

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO  
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

MODELAGEM DE ESCOAMENTO DE FLUIDOS SUPERCRÍTICOS EM DUTOS LONGOS

RUBEM DA CUNHA REIS

Tese para obtenção do Título de  
Doutor em Engenharia Mecânica

ORIENTADOR: PROF. DR. CÉSAR ANTÔNIO LEAL

Porto Alegre, maio de 2000

# MODELAGEM DE ESCOAMENTO DE FLUIDOS SUPERCRÍTICOS EM DUTOS LONGOS

por

Rubem da Cunha Reis

Mestre em Engenharia

Tese submetida ao Corpo Docente do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, PROMEC, da Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Título de

Doutor em Engenharia

Área de Concentração: Fenômenos de Transporte

Orientador: Prof. Dr. César Antônio Leal

Aprovada por:

Prof. Dr. Luiz Fernando Seixas de Oliveira (UFF/RJ)

Prof. Dr. Marco Túlio Menna Barreto de Vilhena (PROMEC/UFRGS)

Prof. Dr. Nilson Romeu Marcílio (CPGEQ/UFRGS)

Prof. Dr. Sérgio V. Möller  
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 12 de Maio de 2000.

*Para Marilene, minha esposa,  
e Amanda, minha filha.*

## RESUMO

Devido à necessidade de vencer grandes distâncias no transporte de fluidos entre unidades de produção e consumo, muitas vezes tem-se escoamento supercrítico, isto é, em condições de pressão muito elevadas, acima da pressão crítica do fluido. Muitos acidentes e incidentes na indústria de processos químicos têm ocorrido em função da falha de acessórios de linha e/ou falhas mecânicas da própria tubulação devido a esta condição de pressão bastante severa. Em caso de vazamento com alta pressão, no interior do sistema, haverá a formação de escoamento crítico. Neste trabalho visa-se determinar, espacial e temporalmente, ao longo da tubulação, as variações de vazão, pressão, temperatura e estado do fluido durante a sua fuga para a atmosfera, decorrente da perda de contenção. A motivação maior para o estudo advém do interesse em avaliação de conseqüências em análise de riscos industriais uma vez que a mesma depende da caracterização da descarga, para a atmosfera, que ocorre, em caso de acidente, com liberação acidental de material perigoso. Discute-se também a utilização da equação de estado termodinâmica para o levantamento de propriedades e sua influência no cálculo do escoamento crítico. Resultados são apresentados para os casos estacionário e transiente, sendo que neste último, para solução, utilizou-se o esquema numérico de Godunov. Com relação aos resultados, tem-se que, em regime estacionário, o fluxo de massa crítico de eteno a 10 MPa, em uma ruptura total de um duto de 0,05 m de diâmetro, os resultados obtidos foram os seguintes: para uma distância de 5000 m, a vazão por unidade de área obtida foi de  $1501 \text{ kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ ; para um vazamento na distância de 10000 m, foi de  $1061 \text{ kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$  e para a distância de 15000 m, foi de  $866 \text{ kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ . Variou-se, ainda, a pressão inicial para vários diâmetros de duto e comprimentos de distância entre o ponto de ruptura e a alimentação de material. Verificou-se, também, a influência da fixação ou não de um valor para o fator de atrito, a influência do caminho termodinâmico, avaliando-se a hipótese isoentrópica contra a isoentálpica e também a influência da presença de isolamento térmico na tubulação ou não. Para simulações realizadas envolvendo inventários de hidrocarbonetos leves em dutos curtos (da ordem de 1000 m), o modelo não apresentou a mesma capacidade de reprodução da realidade física, embora seja possível resolver o sistema de equações que descreve a perda de contenção. Resultados típicos de tempo de duração para atingir-se o regime estacionário em uma tubulação de 0,1 m com escoamento de eteno que inicialmente se encontrava a 10,1 MPa foi de 7,5 segundos para uma distância entre o de reservatório e o local da ruptura de 1000 m. Para uma distância maior, 5000 m, o tempo de estabilização chegou a quase 34 s. Para a validação do modelo utilizou-se dados de inventário de um acidente (Piper Alpha) com gás natu-



ral. Foram utilizados testes de base estatística tanto para comparar os resultados obtidos com o presente modelo como de outros encontrados na literatura, com os dados empíricos. Os resultados da aplicação dos testes estatísticos utilizados foram muito semelhantes aos obtidos para outros modelos, mas com uma considerável vantagem para o modelo aqui apresentado por sua redução bastante significativa de consumo de tempo computacional usado na obtenção da solução.

## ABSTRACT

The need to transport fluids over great distances between producing and consuming units imposes the use of flow under supercritical conditions, that is, very high pressures, above the critical pressure of the fluid. Many accidents and incidents have happened, in the chemical process industries, as a result of failures in components or of the pipeline itself due to these rather severe working pressure levels. In case of accident under very high pressure inside of the system, critical or choked flow will develop. In this work, it is sought the determination, in time and space, of the behavior of mass flow, pressure, temperature and physical state of the fluid, following a full bore pipeline rupture. The main reason for the study is the need to estimate consequences of accidents for risk analysis purposes that depend on the characterization of the fluid discharge to the atmosphere, immediately after the rupture with release of dangerous materials. It is also discussed the use of a thermodynamical equation of state for material properties estimation and its influence on the evaluation of critical flow. Results are presented for steady state and transient cases, where in the latter, the Godunov numerical scheme was used to generate the solution. With respect to results, one has, for the steady state formed as a result of a full bore rupture of an ethylene pipeline with 0.05 m of diameter initially under 10 MPa of pressure, the following: for a rupture occurring at a distance of 5,000 m of the supply unit, the critical mass flow per unit area was  $1,501 \text{ kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ , for the distance of 10,000 m it was  $1061 \text{ kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$  and for the distance of 15,000 m it was  $866 \text{ kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ . Results were also generated for several values of initial pressure, pipeline diameter as well distances to the point of rupture. It was also studied the effect of fixing or not a value for the friction factor, the influence of the thermodynamical path used for the transition between states of the fluid with a comparison of the results obtained with both isentropic and isoenthalpic hypotheses, and finally it was analyzed the variation in the results with and without pipe thermal insulation. For simulations involving light hydrocarbons in short pipelines (of the order of 1,000 m), the similarity with the physical reality was not satisfactory, even though it was possible to solve the system of equations that describe the behavior of the material escaping as a result of the rupture. So, a typical result for the length of time required for establishment of the steady state for a 0.1 m diameter pipeline containing ethylene initially under 10.1 MPa of pressure, was 7.5 s when the rupture occurred at a distance of 1,000. For a larger distance, 5,000 m, the time to stabilize was close to 34 s. For the validation of the model, it was used a set of data from an accident (Piper Alpha) involving natural gas. Statistics based tests were used to compare the results of the present model as well as results available from other

models in the literature, with the empirical data. The results obtained with the use of statistical tests for the present model were similar to the ones obtained for the other models, but with a significant reduction in the time consumed to achieve the numerical solution.

# ÍNDICE

	Pág.
1. INTRODUÇÃO .....	1
1.1 Descrição do problema .....	1
1.2 Revisão da literatura .....	1
1.3 Avaliação da revisão da literatura.....	6
1.4 Objetivos do trabalho .....	7
2. ESCOAMENTO CRÍTICO BIFÁSICO .....	8
2.1 Descrição do escoamento crítico bifásico .....	8
2.2 Modelagem matemática do escoamento crítico bifásico.....	12
2.2.1 Modelo do equilíbrio homogêneo.....	13
2.2.2 Modelo de equilíbrio não-homogêneo.....	14
2.2.3 Modelo isoentálpico.....	15
2.2.4 Modelo homogêneo de não-equilíbrio.....	16
2.2.5 Modelo de Moody.....	16
2.2.6 Outros modelos.....	17
2.3 Escoamento crítico bifásico partindo de condições supercríticas.....	17
3. DESENVOLVIMENTO DO MODELO.....	19
3.1 Equações do balanço.....	20
3.2 Equação de estado.....	22
3.3 Outras funções de estado.....	23
3.4 Despressurização isoentrópica.....	25
3.5 Modelo adotado.....	27
3.6 Tratamento numérico do modelo.....	28
3.7 Equação de estado para líquidos subresfriados.....	33
3.8 Viscosidade de gases e líquidos.....	34
3.9 Fatores para validação.....	35
3.10 Linguagem de programação e "softwares" utilizados.....	36
4 RESULTADOS.....	37
4.1 Regime estacionário.....	38
4.1.1 Perda de contenção por ruptura total de tubulação isolada.....	38
4.1.2 Perda de contenção através de um furo na tubulação.....	43

4.2	Regime transiente.....	45
4.2.1	Considerações gerais.....	45
4.2.2	Resultados obtidos para casos transientes.....	46
4.3	Avaliação da hipótese isoentrópica.....	52
4.4	Influência do isolamento térmico dos dutos. ....	53
4.5	Validação do modelo.....	57
5	CONCLUSÃO.....	64
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	66
	APÊNDICE 1.....	73
	APÊNDICE 2.....	75
	APÊNDICE 3.....	78
	APÊNDICE 4.....	81



## SIMBOLOGIA

### *Minúsculas*

**a** = constante da equação de Peng-Robinson calculada por  $0,45724R^2.T_C^2/p_C$ ;  
**a1,a2,a3,a4** = constantes associadas ao calor específico de uma substância no estado ideal utilizadas nas equações 13 e 15;  
**b** = constante da equação de Peng-Robinson calculada por  $0,0778RT_C/p_C$ ;  
**b1,b2,b3,b4,b5,b6,b7** = constantes da equação COSTALD-COSTALP  
**c** = direção característica;  
**c1,c2,c3,c4** = constantes do ajuste polinomial;  
**e** = energia por unidade de volume;  
**f** = fator de fricção;  
**g** = aceleração da gravidade;  
**h** = entalpia por unidade de massa;  
**m** = constante da equação de estado;  
**n** = constante da equação de estado;  
**p** = pressão;  
**t** = tempo;  
**u** = energia interna;  
**v** = volume específico;  
**w** = velocidade;  
**x** = coordenada espacial;  
**z** = coordenada espacial qualquer

### *Maíúsculas*

**A** = fator da equação de estado; área  
**B** = fator da equação de estado;  
**C** = grandezas calculadas pelo modelo ou levantadas no campo;  
**D** = diâmetro do duto;  
**F** = vetor representado na Equação (16);  
**G** = fluxo de massa;  
**H** = entalpia;  
**I** = perdas por atrito na parede;  
**IC** = índice de Courant;

$J$  = jacobiano;

$L$  = comprimento ou distância do ponto de ruptura à fonte de pressão;

$M$  = momento;

$P$  = fator de geração de energia;

$Q$  = fluxo de calor;

$R$  = constante universal dos gases por unidade molar;

$R^*$  = constante universal dos gases por unidade de massa;

$Re$  = número de Reynolds;

$T$  = temperatura;

$U$  = vetor das grandezas independentes;

$V$  = vetor;

$X$  = fração volumétrica;

$Z$  = fator de compressibilidade;

#### *Letras gregas*

$\alpha$  = forma de dependência com a temperatura da equação de Peng-Robinson modif.por Melhem;

$\varepsilon$  = rugosidade;

$\lambda$  = autovalores e/ou direções características;

$\varphi$  = ângulo do duto com a direção vertical;

$\mu$  = viscosidade;

$\rho$  = massa específica;

#### *Subscritos*

$c$  = devido à convecção na parede; relacionado à escoamento crítico;

$fr$  = devido à fricção;

$G$  = gás;

$L$  = líquido;

$j$  = avanço na dimensão  $x$ ;

$n$  = avanço no tempo;

$o$  = relacionado à condição inicial;

$Q$  = relativo à geração de energia;

$S$  = seção

**Observação:** todas as grandezas são expressas em unidades do Sistema Internacional

## ÍNDICE DE FIGURAS

	Pág.
Figura 3.1 - Esquema para cálculo de propriedades termodinâmicas.....	23
Figura 3.2 – Despressurização isentrópica do eteno utilizando a equação de Peng-Robinson modificada por Melhem et al., 1989.....	26
Figura 3.3 – Aproximação de Godunov da solução ao tempo $n$ .....	29
Figura 3.4 – Localização da região $P$ no gráfico.....	29
Figura 3.5 – Direções características.....	31
Figura 3.6 – Interpretação gráfica da condição CFL.....	32
Figura 4.1 - Maximização do fluxo de massa $G$ de eteno com relação à variação de pressão..	40
Figura 4.2 – Fluxo de massa crítico de eteno em função da distância ao ponto de ruptura.....	41
Figura 4.3 - Esquema para ilustração de descarga através de um furo em um trecho de duto..	44
Figura 4.4 - Perfis de fluxo mássico em vários instantes para a distância de 1000 m.....	47
Figura 4.5 – Perfis de pressão em vários instantes para a distância de 1000 m.....	48
Figura 4.6 - Perfis de fluxo mássico em vários instantes para a distância de 5000 m.....	48
Figura 4.7 – Perfis de pressão em vários instantes para a distância de 5000 m.....	49
Figura 4.8 – Perfis de temperatura para vários instantes (tempo em segundos na legenda).....	51
Figura 4.9 – Avaliação do caminho termodinâmico.....	52
Figura 4.10 – Comparação dos modelos com o inventário de “Piper-Alpha”.....	59
Figura 4.11 – Termo fonte calculado para o acidente de “Piper Alpha”.....	62

## ÍNDICE DE TABELAS

	Pág.
Tabela 4.1 – Fluxo de massa crítico de eteno, determinado em várias condições de pressão inicial, distância da fonte e diâmetros da tubulação utilizando para o fator de atrito, um valor fixo ( $f_{cte}$ )* ou utilizando um valor variável ( $f_{var}$ )** .....	40
Tabela 4.2 – Resultados com aporte de calor à tubulação na despressurização de eteno.....	55
Tabela 4.2 – Resultados com aporte de calor à tubulação na despressurização de gás natural...	56
Tabela 4.4 – Dados das condições de escoamento no acidente de “Piper Alpha” .....	58
Tabela 4.5 – Fator NMSE.....	59
Tabela 4.6 – Razão de pressão do modelo sobre a pressão observada para avaliar fator FA2....	60
Tabela 4.7 – Fator FB em módulo.....	61

## 1. INTRODUÇÃO

### 1.1 Descrição do problema

Devido à necessidade de vencer grandes distâncias entre uma unidade produtora e uma unidade consumidora, é comum ter-se fluidos escoando em condições de pressão muito elevadas. Quando esta pressão supera o valor da pressão crítica do fluido, diz-se que o escoamento ocorre em condições supercríticas. Muitos acidentes e incidentes, na indústria de processos químicos, têm ocorrido em função da falha de acessórios de linha e/ou falhas mecânicas da própria tubulação devido a esta condição de pressão bastante severa. A avaliação de consequências em acidentes com perda de contenção em dutos, para análise de riscos industriais, depende da caracterização da descarga de material que ocorre.

Para a caracterização do processo de liberação de material será desenvolvida uma modelagem do comportamento de um fluido que escoar no sistema e é lançado para a atmosfera, devido a uma ruptura na linha, a uma dada distância da unidade produtora, com formação de um escoamento crítico bifásico. A descrição do escoamento crítico bifásico se dará a partir da avaliação do comportamento das variáveis  $P$  (pressão),  $G$  (fluxo mássico),  $T$  (temperatura) e  $\rho$  (massa específica) ao longo do duto, através de modelagem estacionária e transiente, visando obter a taxa de descarga de material.

### 1.2 Revisão da literatura

A seguir, uma avaliação dos principais trabalhos voltados para o estudo do escoamento crítico bifásico é apresentada, relacionando trabalhos experimentais e teóricos na área de interesse.

Os trabalhos de Moody, 1965 e 1966, apresentam e discutem a modelagem do escoamento crítico bifásico em dutos devido à descarga de fluidos armazenados em vasos pressurizados. Mais tarde, este mesmo autor (Moody, 1975), estudou a taxa máxima de descarga de misturas bifásicas de vasos e as distorções entre previsões teóricas e os resultados experimentais. Concluiu que durante a descarga bifásica de vasos de armazenagem de fluidos, o padrão de escoamento



mento na entrada do duto ligado ao vaso é uma mistura homogênea de bolhas de vapor no líquido. As taxas de escoamento podem ser previstas em termos das propriedades de estagnação do fluido dentro do vaso.

No trabalho de Chen e Isbin, 1966, foi estudado o escoamento bifásico de água através de bocais e aberturas presentes em reservatórios. Os autores determinaram, experimentalmente, o fluxo de massa como função do formato e da razão  $L/D$  da abertura. Verificaram a inexistência de vaporização, no trecho inicial da abertura, assim como a formação de líquido superaquecido nesta mesma região. Um trabalho com enfoque semelhante foi o de Dickson e Markhan, 1969. Estes autores estudaram escoamento adiabático com “flashing” de água em tubos. Discutiram a taxa de formação local de vapor e soluções numéricas são comparadas com resultados experimentais.

Henry et al., 1970, apresentaram estudos sobre o escoamento crítico bifásico oriundo de reservatórios de água, com baixas qualidades de vapor. Seus resultados experimentais foram obtidos em tubos com  $L/D > 40$ , com fluxos mássicos de 2500 a 31500  $\text{kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ , pressões de descarga de 0,28 a 1,03 MPa e qualidades de 0,0019 a 0,216. Após, estes resultados foram comparados com valores previstos em modelo desenvolvido para escoamento bifásico com qualidades menores que 0,02. O modelo exibe boa concordância com dados experimentais para pressões de saída de 0,34 a 1,03 MPa. Um dos autores, Henry, 1970, desenvolveu um modelo para descrever a descarga de líquidos, inicialmente, em estado de saturação e, também, em estado subresfriado em dutos de área constante com razão  $L/D > 12$ . As soluções propostas são baseadas nas condições de estagnação e exibiram boa concordância com resultados experimentais realizados com água, freon-11 e freon-12. Mais tarde, Henry e Fauske, 1971, estudaram, também, o escoamento crítico bifásico através de canais convergentes-divergentes utilizando taxas de transferência de massa, momento e energia. Estudaram, ainda, o escoamento através de orifícios e de tubos curtos. Os modelos foram comparados com dados experimentais obtidos com água, criogênicos e metais alcalinos.

D'Arcy, 1971, em seu trabalho, apresenta uma discussão sobre dois aspectos do escoamento bifásico: a velocidade na qual pequenas perturbações de pressão viajam através do fluido e o fluxo de massa crítico que o escoamento desenvolve devido às condições alcançadas dentro de um duto. Em um escoamento monofásico gasoso, estes dois aspectos do escoamento se confundem, juntamente, com a velocidade do som alcançada pelo fluido no duto. Modelos teóricos da

velocidade de propagação de pequenas perturbações forma comparados com os modelos de escoamento bifásico.

Bouré, 1975, propôs uma representação unificada para modelos de escoamento crítico bifásico. Transformou um modelo de seis equações (três equações de conservação para cada fase – líquida e de vapor) em um modelo com forma particular de três equações com três variáveis dependentes caracterizando a mistura (líquido-vapor) e três equações e três variáveis dependentes caracterizando as diferenças entre as fases.

Malnes, 1975, estudou o escoamento crítico unidimensional com o objetivo de mostrar que o gradiente de pressão vai para o infinito na descarga de uma mistura bifásica. Em escoamento, efeitos bidimensionais podem ocorrer e o gradiente de pressão é limitado. As pressões de saída serão menores do que aquelas previstas pela teoria unidimensional.

Sozzi e Sutherland, 1975, mediram taxas de escoamento crítico com água subresfriada e com água saturada para determinar o efeito da entalpia do fluido e, também, para determinar o efeito da geometria do sistema. Os testes foram conduzidos com pressão inicial do fluido em 6,9 MPa e com temperaturas de descarga na faixa de 232 a 288 °C. Os resultados demonstraram a não há equilíbrio mecânico e térmico entre os estados termodinâmicos (vapor e líquido) no escoamento do fluido.

Simoneau, 1975, estudou a distribuição de pressão em um bocal convergente-divergente durante o escoamento bifásico crítico advindo de despressurização de vasos trabalhando com nitrogênio subresfriado.

Bouré et al., 1976, estudaram a relação entre taxas de escoamento, velocidades sônicas propagação de pequenas perturbações e o fenômeno de transferência em escoamentos monofásicos e bifásicos. Para melhorar o entendimento do fenômeno crítico bifásico foi estudado, paralelamente, o escoamento monofásico. Foi discutido, também, a condição de escoamento crítico, apresentado por estes autores, que estabelece que a criticidade do escoamento é obtida através de autovalores advindos do sistema de equações que descrevem o escoamento. Mais tarde, Trapp e Ranson, 1982, discutiram a implementação numérica do critério de criticidade para escoamento bifásico. Este critério será discutido mais tarde, neste texto.



Pilz e van Herck, 1976, mediram o fluxo de massa crítico para várias substâncias e construíram gráficos relacionando-o com a variação de pressão.

Adron, 1977, propôs um modelo para prever o fluxo de massa crítica de água, que inicialmente estava saturada, levando em consideração a densidade de nucleação de bolhas de vapor e o não-equilíbrio térmico entre o líquido e as bolhas de vapor.

Wallis, 1980, discute o escoamento crítico bifásico relacionando e comparando vários modelos existentes. Nesta mesma linha Giot e Fritte, 1983, Schrock e Amos, 1984, Leung e Nazario, 1984, também estudaram a validade dos modelos de escoamento crítico bifásico.

Michaelides, 1983, apresentou um modelo de escoamento crítico bifásico baseado no princípio da maximização da entropia: o escoamento atinge seu valor crítico quando a entropia é máxima.

Favrat e Denisart, 1984, Grolmes, 1984, Grolmes e Fauske, 1984 e Grolmes et al., 1984, estudaram a vaporização formada através de despressurização rápida de fluidos com formação de escoamento crítico bifásico em várias geometrias. Grolmes e Leung, 1984, estudaram ainda vários modelos de escoamento crítico bifásico sob o enfoque de parâmetros de escala e de similaridade.

Elias e Chambré, 1984, estudaram a influência da formação de bolhas na determinação do escoamento crítico bifásico. Propuseram um modelo que leva em conta o mecanismo de crescimento de bolhas de vapor no líquido durante o escoamento e avaliaram dados para água saturada e subresfriada em tubos verticais e horizontais. Obermeier, 1990, estudou os limites termodinâmicos, provocados pelo não-equilíbrio líquido-vapor, de taxas de vazão crítica da descarga de refrigerantes em tubos e orifícios.

Nielsen, 1991, testou a validação de modelo de escoamento crítico bifásico homogêneo com resultados experimentais obtidos com descarga de água em duto de dois metros acoplado a um tanque, observando boa concordância entre eles. Em um outro trabalho de validação de modelo voltado para descarga bifásica em dutos, Richardson e Saville, 1991, trabalharam com inventários de descarga de hidrocarbonetos em um duto submerso, que inicialmente se encontrava à pressão de 11,7 MPa e à temperatura de 283 K. O caso de estudo lá tratado concerne à descarga

de uma mistura de hidrocarbonetos leves (gás natural) devido à ruptura total de uma tubulação de 54 km de comprimento equivalente, com diâmetro de 0,4191 m, submersa, que ligava duas plataformas (chamadas de “Piper Alpha” e MCP-01). Este acidente ocorreu entre os dias 6 e 7 de julho de 1988. Os autores compararam os resultados de campo com a simulação por computador utilizando um código denominado “BLOWDOWN” e, para levantamento das propriedades termodinâmicas, os autores utilizaram a metodologia dos estados correspondentes.

Jones, 1992a, 1992b e 1992c, e Drew, 1992, estudaram as bases teóricas de elementos de escoamento bifásico, avaliando, também limitações do modelo de equilíbrio homogêneo. Dagan et al., 1993, desenvolveram um modelo para escoamento crítico que leva em conta o não-equilíbrio térmico entre as bolhas de vapor no líquido e o movimento relativo da interface. Nikitopoulos, 1993, realizou uma formulação que relaciona efeitos de compressibilidade e número de Mach em problemas de escala em escoamento bifásico.

Giot, 1994, estudou a influência da geometria durante a formação do escoamento crítico. Quando o fluido inicialmente contido em um vaso ou em uma tubulação é um líquido e vaporiza a uma pressão mais alta do que a pressão atmosférica, uma mistura bifásica aparece. A qualidade desta mistura, o padrão de escoamento e o tamanho das gotas de líquido formadas determinam o desenvolvimento do escoamento fora do vaso ou do circuito e necessita ser considerado como condições de contorno para o dado sistema. Kim e O'Neal, 1994, realizaram uma investigação experimental do efeito da presença de óleo, à base de propilalquileno glicol, em escoamento bifásico de refrigerante 134a.

Khajehnajafi e Shinde, 1994, apresentam resultados de modelagem quasi-estacionária para descarga de tanques através da tubulação ligada a estes vasos. Além disto, apresentam, também resultados transientes desta descarga. Nesta linha, Seynhaeve et al., 1994, realizaram a modelagem de transientes rápidos em tubos longos com a ocorrência de escoamento crítico bifásico, utilizando, para isto, em esquema numérico explícito.

Elias e Lellouche, 1994, apresentam extensa revisão sobre escoamento crítico bifásico. Estabeleceram comparações entre vários modelos e metodologias para determinação do valor crítico do escoamento discutindo qual o modelo mais adequado. Comparações com resultados experimentais foram realizados.



Kim e O'Neal, 1995, compararam modelos de escoamento crítico bifásico de refrigerantes (22 e 134a) através de orifícios em tubos curtos. Minato et al., 1995, realizaram estudos de modelagem numérica em escoamento crítico bifásico de água usando por base uma estrutura bidimensional. Na linha de modelagem em tubos curtos, Chun et al., 1996, investigaram taxas de escoamento crítico bifásico de água em pequenos diâmetros. Ochi et al., 1996, aplicaram um modelo de três camadas com mudança de fase com água e seu vapor e dióxido de carbono, com comparação com resultados experimentais. Gebbeken e Eggers, 1997, também trabalhando com dióxido de carbono, mediram o fluxo crítico formado a partir de despressurização, mantido em um vaso sob pressão supercrítica.

Ghiaasiaan e Geng, 1997 e 1998, desenvolveram um modelo para escoamento crítico bifásico de líquidos subresfriados contendo não-condensáveis dissolvidos. Lee et al., 1998, desenvolveram um código para despressurização devido à acidente em reatores nucleares refrigerados com água pressurizada em valores supercríticos. Draï et al., 1998, nesta linha de desenvolvimento de despressurização acidental de ambientes contendo líquidos à alta pressão, realizaram um estudo numérico e experimental, comparando modelos de escoamento crítico bifásico com valores medidos. Hager et al., 1998, trabalharam com o projeto de bueiros para escoamento de fluidos que vêm a desenvolver escoamento crítico bifásico. Fairuzov, 1998, estudou e comparou com dados de campo, a descarga de gás liquefeito de petróleo (GLP) em tubulações com comprimento de 100 m.

Mahgerefteh et al., 1999, trabalharam com o inventário da tragédia de “Piper Alpha”, já relatado em Richardson e Saville, 1991, comparando os dados de campo com os resultados gerados através do código “CNGS-MOC”, que trabalha com a solução numérica que utiliza o método das características (que pode ser encontrado em Ames, 1992). Os autores compararam os seus resultados com modelos de outros pesquisadores e com os resultados de campo do acidente. Relativamente aos dados termodinâmicos, os autores utilizaram a equação de Peng-Robinson.

### 1.3 Avaliação da revisão da literatura

Em geral, pode-se afirmar que os trabalhos publicados quando tratam de modelagem de escoamento bifásico, tratam o problema com sistemas algébricos implícitos ou sistemas numéri-



cos que envolvem cálculos com grande consumo de tempo para obtenção do fluxo de massa crítico.

Além disto, nestes trabalhos voltados para modelagem e simulação deste fenômeno, não se menciona a influência da utilização de uma equação de estado mais elaborada para levantamento de propriedades termodinâmicas do fluido (exceção feita aos trabalhos de Richardson e Saville, 1991 e Mahgerefteh et al., 1999, que mostram a utilização de metodologia e de equações mais robustas). As condições iniciais do fluido, normalmente, referem-se a seu estado de saturação (equilíbrio líquido-vapor). Os modelos relacionados não trabalham com a condição de escoamento, em dutos, na qual o fluido estaria em condições de pressão mais elevadas do que a de saturação, como condições de subresfriamento mais pronunciada ou mesmo com condições de pressão acima do valor crítico (pressão supercrítica). Uma dificuldade a mais é a falta de dados experimentais para comparação do comportamento do fluido escoando nestas circunstâncias, pois os trabalhos experimentais se preocupam em maior número com a descarga de tanques em dutos compartilhados, provocando a despressurização em dutos com razão  $L/D$  menores que 100. Assim, o desenvolvimento do modelo que inclua o uso de uma equação de estado mais robusta e que parte de pressões supercríticas, pode representar uma contribuição significativa ao estudo do escoamento crítico bifásico.

#### 1.4 Objetivos do trabalho

Neste trabalho, visa-se discutir e apresentar o resultado das simulações do comportamento de um fluido escoando em um duto longo em condições supercríticas, decorrente de um vazamento para a atmosfera a uma dada distância da unidade produtora. O interesse maior reside em estimar a quantidade de material e em que condições de temperatura, pressão e estado físico dá-se a liberação, para aplicação em análise de riscos industriais. Discute-se, também, as condições que se formam quando o fluido atinge a vazão crítica calculada com uma equação de estado cúbica, no caso, a equação de Peng-Robinson modificada por Melhem et al., 1989. A situação de interesse prático é a de gasodutos, trabalhando em pressões supercríticas. Assim, parte-se de condições iniciais típicas utilizadas em gasodutos que levam a um escoamento bifásico com formação de equilíbrio líquido-vapor no processo de vazamento para a atmosfera.

## 2. ESCOAMENTO CRÍTICO BIFÁSICO

### 2.1 Descrição do escoamento crítico bifásico

Fluídos escoam em um sistema devido à diferença de pressão entre diferentes pontos do mesmo, este escoamento, sob certas condições é classificado de escoamento crítico. Segundo Wallis, 1980, o conceito de escoamento crítico é basicamente simples: um sistema contendo um fluido sob pressão em comunicação com um receptor a uma pressão mais baixa, quando em condições de escoamento crítico, verifica-se que a taxa de escoamento no sistema independe das condições do receptor.

O escoamento crítico de um gás (monofásico) ocorre quando o número de Mach (relação entre a velocidade do gás e a velocidade do som, nas condições locais) é unitário no ponto onde a área de seção transversal é mínima. Normalmente, o fenômeno de relaxação molecular é suficientemente rápido para que o equilíbrio termodinâmico ocorra, mesmo a velocidades altas, no caso de gases (escoamento monofásico).

No escoamento bifásico o fenômeno é mais complicado. Os tempos de relaxação para a formação de novas interfaces (nucleação), transferência de calor, massa, momento e a evolução dos padrões de fluxo, são comparáveis ao tempo gasto pelo fluido na região crítica. Mas ainda assim pode ser possível definir-se uma condição matemática de criticalidade, em um dado ponto no escoamento.

No trabalho de Ellias e Lellouche, 1994, é citado que, para desenvolver as bases para o entendimento do escoamento crítico, primeiro é conveniente considerar um escoamento monofásico de um vapor em um tubo de área de seção constante. A formulação correta deve levar a um conceito de escoamento crítico, onde o fluxo não depende de mudanças das condições a jusante, tanto para o escoamento monofásico como para o bifásico. Contudo, conforme anteriormente citado, para o escoamento monofásico, a velocidade crítica é igual à velocidade isoentrópica local do som. Já a velocidade crítica no escoamento bifásico é mais complicada de prever, pois a expansão rápida do fluido pode induzir um não-equilíbrio mecânico e térmico entre as duas fases.

Considerando-se o escoamento unidimensional estacionário de um vapor isotérmico, somente a equação do balanço de momento é importante e pode ser escrita da seguinte forma:

$$\frac{d}{dz}(\rho w^2) + \frac{d}{dz}P + \rho \cdot g + f \frac{\rho w^2}{2D} = 0 \quad (2.1)$$

onde  $z$  é a coordenada espacial,  $\rho$  é a massa específica,  $w$  é a velocidade na direção  $z$ ,  $P$  é a pressão,  $g$  é a aceleração da gravidade,  $f$  é o fator de atrito e  $D$  é o diâmetro interno do duto.

No estado estacionário, o fluxo de massa  $\rho w = G_0$  é espacialmente constante e a Equação (2.1) pode ser reescrita como

$$G_0^2 \frac{dv}{dz} + \frac{dP}{dz} + \rho \cdot g + f \frac{G_0^2}{2\rho D} = 0 \quad (2.2)$$

onde  $v$  é o volume específico ( $\rho^{-1}$ ). Se a temperatura é constante, a massa específica é uma dada função que depende somente da pressão e se esta função e  $f$  o fator de atrito são especificados nas condições de entrada, então a Equação (2.2) pode ser resolvida para  $\rho(z)$  e  $P(z)$  obtendo-se

$$\frac{dP}{dz} = - \frac{\rho \cdot g + f \frac{G_0^2}{2 \cdot \rho \cdot D}}{1 - \frac{G_0^2}{\rho} \frac{d\rho}{dP}} \quad (2.3)$$

No ponto crítico  $\frac{dP}{dz} \rightarrow -\infty$  quando

$$\frac{G_0^2}{\rho^2(z)} \cdot \frac{d\rho}{dP} = 1 \quad (2.4)$$

Em um sistema com estagnação especificada e pressões sendo diminuídas, o fluxo de massa é uma consequência do processo de escoamento e se ajustará, de tal forma, que o seu valor crítico ocorrerá na saída do duto. Assim, a taxa de escoamento, que pode ser forçada através de um tubo de comprimento  $L$ , é limitado pela Equação (2.4) em  $z = L$ .

Para um escoamento bifásico, a equação análoga do balanço de momento pode ser apresentada como

$$\frac{dP}{dz} \left[ 1 + \frac{\partial \overline{Gw}}{\partial \rho} \right] = - \left( F + \overline{\rho g} \right) - \frac{\partial \overline{Gw}}{\partial T} \cdot \frac{dT}{dz} \quad (2.5)$$

Na expressão de  $\frac{d}{dz} \overline{Gw}$  na Equação (2.5), é assumido que  $\overline{Gw}$  é função da temperatura e da pressão e sendo definida como  $\overline{Gw} = G_G w_G + G_L w_L$ . A equação da continuidade implica que, em estado estacionário, o fluxo de massa é constante. Assim,

$$\frac{d}{dz} \overline{Gw} = G_o^2 \frac{d}{dz} \left( \frac{1}{\rho^I} \right) \quad (2.6)$$

$$\frac{1}{\rho^I} = \frac{x^2}{\varepsilon \rho_G} + \frac{(1-x^2)}{(1-\varepsilon) \rho_L} \quad (2.7)$$

A condição para escoamento crítico ou escoamento máximo da mistura é

$$\frac{\partial}{\partial \rho} \overline{Gw} = -1 \quad (2.8)$$

O resultado obtido na Equação (2.8) faria com que  $\frac{dp}{dz} \rightarrow -\infty$  na Equação (2.5), ou seja, seria atingido o valor crítico no escoamento.

Com relação à velocidade sônica, Elias e Lelloche, 1994, descrevem que ela é a velocidade com que a informação, devida a distúrbios de pressão, viaja em um fluido. Se um objeto no fluido ou uma porção do fluido viajar mais rapidamente do que esta velocidade, uma onda de choque se formará. Em um fluido monofásico (vapor), esta velocidade é definida pela Equação (2.4) e pode ser escrita como

$$w^2(L) = \frac{dP}{d\rho} = a^2 \quad (2.9)$$



No escoamento monofásico, a equação do momento, a qual contém informação da velocidade do fluido (movimento da massa do fluido) e da velocidade do som, pode não registrar a velocidade do escoamento local alcançando o valor da velocidade do som porque a informação concernente à geometria à montante pode somente viajar à mesma velocidade.

Assim, a velocidade do escoamento é dita estar "estrangulada". No equilíbrio, a condição de "estrangulamento" para a Equação (2.8) pode ser dada como

$$\frac{-2}{w} = \frac{dP}{d\rho^I} \quad (2.10)$$

O termo da direita da Equação (2.10) tem o mesmo significado que o quadrado da velocidade do som, mas não é claro que o ele seja a mesma velocidade. Para demonstrar a diferença entre as duas velocidades, pode-se considerar, por exemplo, o escoamento de uma mistura bifásica em um duto horizontal longo. Se o duto é longo, o escoamento se separará mesmo a altas velocidades. Nesta situação há uma região só de vapor acima, uma região bifásica abaixo e uma região, mais abaixo ainda, só de líquido. Em cada região monofásica, a informação pode se propagar à velocidades sônicas respectivas de cada fase, mas cada uma é diferente da outra. Assim, as equações básicas não são válidas e duas séries de equações precisam ser estabelecidas (uma série para o gás e outra série para o líquido) para analisar totalmente a situação.

Um critério generalizado para estimativa do escoamento crítico bifásico foi apresentado em Trapp e Ranson, 1982, com o modelo apresentado como um sistema de equações diferenciais parciais de primeira ordem quasi-linear, da forma:

$$A(U)\frac{\partial U}{\partial t} + B(U)\frac{\partial U}{\partial x} + C(U) = 0 \quad (2.11)$$

onde  $U$  é um vetor das variáveis dependentes primárias. Então, a velocidade de propagação do sinal ao longo do plano espaço-tempo é definido como a parte real das raízes  $\lambda_i$  da equação característica ( $i \leq n$ , com  $n$  sendo o número de equações diferenciais compreendendo o modelo).

$$\text{Det} [A(U).\lambda - B(U)] = 0 \quad (2.12)$$



Em um sistema hiperbólico de equações (obtido quando o problema bifásico está bem posto), todas as raízes da Equação (2.12) são reais. O fenômeno de choque ocorrerá quando o sinal acústico, que se propaga com velocidade maior relativa ao fluido, ficar estacionário. Nesta condição, nenhuma informação pode propagar da região da solução para o exterior. Assim, o critério de choque pode ser dado como

$$\lambda_i \geq 0, \text{ para todo } i \leq n \quad (2.13)$$

## 2.2 Modelagem matemática do escoamento crítico bifásico.

Modelos analíticos para o escoamento bifásico são baseados em extensões diretas de formulações de escoamento monofásico. Nestes modelos, a massa específica e a entalpia são definidas para uma mistura ponderal levando em conta a fração de vaporização, como no modelo apresentado no trabalho de Henry e Fauske, 1971, assumindo, ainda, equilíbrio térmico e mecânico entre as duas fases. Soluções analíticas podem também ser derivadas quando equilíbrio mecânico é relaxado (Moody, 1965) e quando fricção na parede é assumida (Moody, 1966).

Outros trabalhos levam em conta transferência de massa e de momento na interface empregando uma formulação para o gás e outra para a fase líquida no escoamento, como por exemplo em Ardron, 1978.

De qualquer forma, os modelos, em geral, consideram a descarga de um fluido armazenado em um tanque em condições de saturação. Analisam o escoamento em um duto acoplado ao vaso até que o fluido, que é uma mistura líquido-vapor, atinja o seu valor crítico. Nenhum modelo discutido foi utilizado para descrever o comportamento de um escoamento bifásico partindo de condições de pressão supercrítica. Outra consideração a ser feita é que os modelos propostos são estacionários e voltados para a descarga de tanques para dutos acoplados, onde o escoamento crítico se configura em distâncias muito próximas do ponto de estagnação (tubos curtos). Poucos trabalhos se dedicam a estudar o comportamento do escoamento crítico bifásico transiente ocorrendo em dutos longos (Seynhaeve et al., 1994).

A seguir, serão apresentados os modelos mais comuns para caracterização do fenômeno de escoamento crítico bifásico, desde os que levam em conta o equilíbrio mecânico e térmico entre as fases, até os que levam em conta a transferência de massa e momento entre fases.

### 2.2.1 Modelo do equilíbrio homogêneo

Este modelo, desenvolvido por Fauske em 1962 e publicado no trabalho de Henry e Fauske, 1971, é baseado na hipótese do escoamento em equilíbrio ser isoentrópico. Neste caso, a equação da energia, sem entrada de calor, para um escoamento entre um vaso e o ambiente, toma a seguinte forma:

$$\frac{w^2}{2} + H(z) = H_0 \quad (2.14)$$

na qual resulta

$$G = \left[ 2 \cdot \overline{\rho}_v^{-2} (H_0 - H_v) \right]^{\frac{1}{2}} \quad (2.15)$$

Aqui, o fluxo de massa está em estado estacionário e  $H_0$  refere-se à entalpia no vaso.  $H_v$  e  $\overline{\rho}_v$ , respectivamente, são a entalpia e a massa específica na garganta da abertura para a atmosfera. As condições da garganta são determinadas pelas seguintes definições, baseadas na hipótese de escoamento isoentrópico:

$$x_v = \frac{s_0 - s_L}{s_{LG}} \quad (2.16)$$

$$H_v = H_L + x_v H_{LG} \quad (2.17)$$

$$\frac{1}{\overline{\rho}_v} = v_v = v_L + x_v v_{LG} \quad (2.18)$$

$$\frac{1}{a_{HE}^2} = \frac{d\overline{\rho}_v}{dP} = \overline{\rho}_v^{-2} \left\{ \frac{dv_L}{dP} - \left( \frac{v_{LG}}{s_{LG}} \right) \frac{ds_L}{dP} + x_v \left[ \frac{dv_{LG}}{dP} - \left( \frac{v_{LG}}{x_{LG}} \right) \frac{ds_{LG}}{dP} \right] \right\} \quad (2.19)$$

Onde  $s_v$  e  $s_0$  são as entropias na garganta (em função da fração de vapor) e de estagnação, respectivamente;  $a_{HE}$  é a velocidade do som homogênea e todas as propriedades de líquido e vapor são calculadas na garganta, assumindo condições de saturação.

O fluxo crítico é determinado pela maximização da Equação (2.15) com respeito à pressão.

### 2.2.2 Modelo de equilíbrio não-homogêneo.

Este modelo, originalmente derivado por Moody, 1965 é uma extensão do modelo anterior em que se permite diferentes velocidades de líquido e de vapor. A razão de velocidade  $S_p$ , definida como a razão entre as velocidades do vapor e do líquido, é considerada e tratada como uma variável que é determinada pelas condições do fluxo de massa máximo na saída. Assumindo que as fases líquida e de vapor estão a mesma temperatura ao longo do escoamento, o modelo fica

$$H + \frac{xw_G^2}{2} + \frac{(1-x)w_L^2}{2} = H_o \quad (2.20)$$

As velocidades são

$$w_L = \frac{G(1-x)}{\rho_L(1-\varepsilon)} \quad (2.21)$$

$$w_G = \frac{Gx}{\rho_G\varepsilon} \quad (2.22)$$

O escoamento é aproximado por um processo isoentrópico. Assim

$$G = (\rho'') \sqrt{2[H_o - H(P, s_o)]} \quad (2.23)$$

$$\frac{1}{\rho''} = \left[ \frac{x}{\rho_G} + \frac{S(1-x)}{\rho_L} \right] \left[ \frac{1-x}{S^2} + x \right]^{\frac{1}{2}} \quad (2.24)$$

Nas Equações (2.23) e (2.24) nota-se que para certas condições de estagnação, o fluxo de massa depende da pressão estática local e da razão  $S$ . A escolha da razão  $S$  não é única, mas presume-se que o fluxo de massa  $G$ , além de ser maximizado com relação à pressão, deve ser maximizado, também, com relação à razão  $S$ . Assim, com esta restrição adicional

$$S = \left( \frac{\rho_L}{\rho_G} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (2.25)$$

A razão  $S$ , descrita pela Equação (2.25), minimiza a energia cinética específica de uma mistura bifásica. Uma formulação teórica para a razão  $S$  que minimiza o momento bifásico específico foi derivada por Henry e Fauske, 1970, que obteve

$$S = \left( \frac{\rho_L}{\rho_G} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.26)$$

### 2.2.3 Modelo isoentálpico.

Elias e Lellouche, 1994, citam este modelo como uma aproximação para resolver as três equações de conservação sem o recurso da utilização da entropia. A condição de expansão isoentálpica é assumida. Assim, as três equações são

$$G.A = w_o \quad (2.27)$$

$$H + \frac{1}{2} \frac{G^2}{\rho^2} = H_o \quad (2.28)$$

$$P + \frac{1}{2} \frac{G^2}{\rho} = M' o \quad (2.29)$$

A Equação (2.27) é a taxa de massa. A Equação (2.28) é a equação da entalpia constante e a Equação (2.29) é o escoamento horizontal sem atrito.

Para escoamento homogêneo em equilíbrio térmico, estas equações podem ser resolvidas utilizando a qualidade na garganta como

$$x_T = 1 + \frac{H_o - H_G - (M_o' - P_T)v_G}{H_{LG} + (M_o' - P_T)v_G} \quad (2.30)$$

Para usar o modelo isoentálpico para um caso mais geral necessita-se substituir  $\rho$  na Equação (2.28) e na Equação (2.29) por  $\bar{\rho}''$  da Equação (2.24). Assim, obtém-se:

$$x_T H_{LG} + (M_o' - P_T) \left( \frac{x_T}{S \rho_G} + \frac{1 - x_T}{\rho_L} \right) \left[ \frac{S^2 x_T + 1 - x_T}{S x_T + 1 - x_T} \right] = H_o - H_L \quad (2.31)$$



### 2.2.4 Modelo homogêneo de não-equilíbrio.

Os modelos analíticos discutidos até agora, são baseados numa derivação termodinâmica e não usam a velocidade do som bifásica do número de Mach como condição crítica. Consequentemente, quando a hipótese de escoamento homogêneo em equilíbrio mecânico é utilizada, o número de Mach previsto na garganta  $M = Gc.(\overline{a_{HE}.\rho})^{-1/2}$  pode ser maior do que a unidade. Um modelo citado em Elias e Lellouche, 1994, combina o equilíbrio termodinâmico com o equilíbrio mecânico, empregando as equações do modelo isoentálpico, Equações (2.27) a (2.29), assumindo que o escoamento é homogêneo e que o plano de choque da fase líquida fica metaestável (superaquecido). A fase vapor é assumida estar em equilíbrio à pressão da garganta.

Assim, a fração de vapor na garganta é dada como

$$x_T = \frac{H_O - H_L - (P_O - P_T)v_L}{H_{LG} + (P_O - P_T)v_{LG}} \quad (2.32)$$

As Equações (2.27) a (2.29) e a Equação (2.32) são resolvidas simultaneamente, utilizando um procedimento iterativo duplo.

### 2.2.5 Modelo de Moody

Em tubos longos, o efeito da fricção na parede pode tornar-se importante na determinação do escoamento crítico. Um modelo de escoamento crítico derivado da descarga de tanques em dutos acoplados, foi desenvolvido por Moody, 1966, para levar em conta os efeitos do atrito em termos de um parâmetro  $f.L/D$ , onde  $f$  é um fator de fricção médio e  $L/D$  é a razão comprimento-diâmetro do duto. Este modelo é estabelecido para um tubo de seção constante com nenhuma contração com escoamento estacionário. As equações básicas são mostradas a seguir. Nas Equações (2.34) e (2.35),  $\rho'$  e  $\rho''$  são, respectivamente, as densidades de momento e energia definidas nas Equações (2.7) e (2.24), respectivamente

$$G = G_0 \quad (2.33)$$

$$G^2 \frac{d\left(\frac{1}{\rho}\right)}{dz} = -\left(\frac{dP}{dz} + \tau_w\right) \quad (2.34)$$

$$H_0 = H_L + xH_{LG} + \frac{1}{2}\left(\frac{G}{\rho'''}\right)^2 \quad (2.35)$$

$$\tau_w = \phi_{lo}^2 \frac{f \cdot G^2}{2 \rho_L D} \quad (2.36)$$

$$\phi_{lo}^2 = \left(\frac{1-x}{1-\varepsilon}\right)^2 \quad (2.37)$$

onde  $x$  é a fração volumétrica de vapor e  $\varepsilon$  é a fração mássica de vapor.

#### 2.2.6 Outros modelos.

Há ainda modelos citados em Elias e Lellouche, 1994, como o de "Richter", onde são utilizadas duas equações de conservação de massa (uma para o vapor e a outra para o líquido), duas equações de conservação de momento (novamente uma para o vapor e outra para o líquido) e uma equação de conservação de energia (este modelo leva em conta forças de fricção interficiais no escoamento bifásico), ou o modelo de "Elias-Chambré", que leva em conta equações que tentam descrever o tamanho e o crescimento de bolhas de vapor superaquecidas durante o escoamento.

### 2.3 Escoamento crítico bifásico partindo de condições supercríticas

Há muito poucos trabalhos na literatura voltados para o problema do escoamento crítico bifásico, inicialmente, em condições termodinâmicas supercríticas. Este fato foi sentido por outros autores, como Mahgerefteh et al., 1999. Poucos inventários de descargas de fluidos, nestas condições, foram publicados. E, mais especificamente com relação à descarga devido ao escoamento em dutos longos, identificou-se apenas o trabalho de Richardson e Saville, 1991, onde tem-se o inventário do acidente de "Piper Alpha" (ruptura total de um duto submarino que ligava duas plataformas de petróleo) e onde os autores comparam os dados de campo com os resultados de seu modelo, denominado de "BLOWDOWN".

Gebbeken e Eggers, 1997, investigaram experimentalmente a descarga para atmosfera de dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ) armazenado em um vaso em condições supercríticas. As condições iniciais foram escolhidas de tal forma que o processo de despressurização fosse conduzido à esquerda do ponto crítico, fazendo com que o sistema alcançasse a zona de saturação. As investigações foram focadas na pressão e na temperatura transiente com a medição de seus perfis, assim como a medição de perfis da fração volumétrica de vapor. O processo analisado foi quasi-isoentrópico.

Mahgerefteh et al., 1999, também trabalhando sobre o inventário do acidente de “Piper Alpha”, simularam numericamente, utilizando o método das características e trabalhando com uma equação de estado cúbica (equação de Peng-Robinson). Obtiveram boa concordância com os dados de campo e, segundo os autores, com um baixo consumo de tempo computacional, comparado com a metodologia adotada em outros modelos como o “META-HEM”, “BLOWDOWN”, entre outros

Do exposto, vê-se que o tema é complexo. Modelar um fenômeno físico com transiente tão rápido, envolvendo mudança de fase e escoamento crítico, torna-se difícil. Principalmente quando se tenta utilizar uma equação de estado robusta, como uma equação de estado cúbica, pois este uso onera o tempo computacional envolvido na solução numérica do sistema de equações diferenciais que modelam o escoamento.



### 3. DESENVOLVIMENTO DO MODELO

Os modelos voltados para descrever o escoamento crítico bifásico, apresentados no item 2.2, foram utilizados, na maioria das situações, para descarga em dutos de material armazenado em tanques. Nestes casos, o fluido se encontra, normalmente em estado de saturação com a fase líquida em equilíbrio com a fase de vapor com o fenômeno crítico bifásico ocorrendo a uma distância próxima do duto. Além disto, as condições de armazenagem dão-se em pressões de saturação relativamente baixas.

O problema que será tratado aqui envolve uma situação onde o fluido é transportado em dutos muito longos e, devido à necessidade de vencer grandes distâncias, é pressurizado em valores acima do ponto crítico. Com isto, no momento que há a perda de contenção na tubulação, boa parte do fluido ainda se mantém na forma de um líquido subresfriado. Assim, dentre os modelos apresentados, o que mais se adequaria a representar a influência do comprimento do duto e seus efeitos de atrito sobre o fluido, seria o modelo de Moody (seção 2.2.5). Este modelo trata a mistura líquido-vapor na mistura bifásica como um fluido único, sendo o fluxo mássico caracterizado de forma ponderal, através da fração de vaporização. Mas cabe aqui uma observação: na forma proposta, as equações do modelo tratam do problema estacionário.

Para descrever o problema não-estacionário, Seynhaeve et al., 1994, utilizaram uma formulação muito parecida com a adotada por Moody, 1966, levando em consideração a modelagem de transientes rápidos em dutos longos.

A razão da não utilização de um modelo para escoamento bifásico de dois fluidos (uma série de equações para descrever o comportamento do líquido e outra série de equações para descrever o comportamento do vapor) é porque a implementação de modelos deste tipo é bastante onerosa em termos de consumo de tempo computacional (Elias e Lellouche, 1994).

Assim sendo, na seqüência, serão apresentadas as equações do balanço original e, no decorrer desta seção, as considerações e simplificações adotadas para a criação do modelo utilizado, admitindo-se, também que o processo de despressurização do fluido sendo transportado se desse isoentropicamente, já que os resultados de Gebbeken e Eggers, 1997, indicam que esta forma é adequada.



### 3.1 Equações do balanço de massa, momento e energia.

As equações de balanço que descrevem o escoamento unidimensional de um fluido em condições supercríticas podem ser escritas para cada fase individual ou para ambas as fases combinadas.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho w}{\partial x} + \frac{\rho w}{A_s} \frac{dA_s}{dx} = 0 \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial \rho w}{\partial t} + \frac{\partial (\rho w^2 + P)}{\partial x} + \rho g \cos \phi + \frac{\rho w^2}{A_s} \frac{dA_s}{dx} + \frac{\partial P}{\partial x} I_{fr} = 0 \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial \rho \left( u + \frac{w^2}{2} \right)}{\partial t} + \frac{\partial \rho w \left( H + \frac{w^2}{2} \right)}{\partial x} + \frac{\rho w}{A_s} \left( H + \frac{w^2}{2} \right) \frac{dA_s}{dx} + \rho w g \cos \phi + \frac{Q_c}{A_r} - \rho P_Q = 0 \quad (3.3)$$

A Equação (3.1) representa o balanço de massa, a Equação (3.2) representa o balanço de momento e a Equação (3.3) representa o balanço de energia. Definindo

$$G = \rho w \quad (3.4)$$

$$e = \rho \left( u + \frac{w^2}{2} \right) \quad (3.5)$$

as Equações (3.1) a (3.3) podem ser reescritas da seguinte forma

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial G}{\partial x} + \frac{G}{A_s} \frac{dA_s}{dx} = 0 \quad (3.6)$$

$$\frac{\partial G}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left( P + \frac{G^2}{\rho} \right) + \rho g \cos \phi + \frac{G^2}{\rho A_s} \frac{dA_s}{dx} + \frac{\partial P}{\partial x} I_{fr} = 0 \quad (3.7)$$

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{G}{\rho} (e + P) \right] + \frac{G}{\rho A_s} (e + P) \frac{dA_s}{dx} + Gg \cos \phi + \frac{Q_c}{A_r} - \rho P_Q = 0 \quad (3.8)$$

Uma outra representação possível das Equações (3.6) a (3.8) é na forma vetorial apresentada a seguir:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F(U)}{\partial x} = V(U) \quad (3.9)$$

onde

$$U = \begin{bmatrix} \rho \\ G \\ e \end{bmatrix} \quad (3.10)$$

$$F(U) = \begin{bmatrix} G \\ P + \frac{G^2}{\rho} \\ \frac{G}{\rho} (e + P) \end{bmatrix} \quad (3.11)$$

$$V(U) = \begin{bmatrix} -\frac{G}{A_s} \frac{dA_s}{dx} \\ -\rho g \cos \phi - \frac{G^2}{\rho A_s} \frac{dA_s}{dx} - \frac{\partial P}{\partial x} I_{fr} \\ -\frac{G}{\rho A_s} (e + P) \frac{dA_s}{dx} - Gg \cos \phi - \frac{Q_c}{A_r} + \rho P_Q \end{bmatrix} \quad (3.12)$$

O sistema de equações descrito acima, é composto por três equações, oriundas dos balanços de massa, momento e energia e, mais a equação de estado. As incógnitas são a massa específica  $\rho$ , o fluxo de massa  $G$ , a energia  $e$  (que pode ser expressa como uma função da massa específica, do fluxo de massa e da temperatura  $T$ ) e a pressão  $P$  (que através de uma equação de estado, pode ser expressa como função da massa específica e da temperatura). Além disto, este sistema de equações é hiperbólico, segundo Ames, 1992, com não-linearidade bastante expressiva.

### 3.2 Equação de estado.

Um importante aspecto do escoamento bifásico é o cálculo de propriedades e do equilíbrio termodinâmico que levem em conta os desvios do comportamento ideal nas fases líquida e de vapor. Estes desvios do comportamento ideal são usualmente atribuídos a elevadas pressões e/ou à presença de moléculas assimétricas ou altamente polares na substância.

Modelos de coeficientes de atividade podem ser usados para descrever não-idealidades da fase líquida em regiões de baixa ou de moderada pressão. Entretanto, dificuldades computacionais e imprecisões são encontradas quando cálculos de equilíbrio são realizados com compostos em condições supercríticas.

Equações de estado cúbicas apresentam facilidades computacionais para correlacionar equilíbrio de fase para hidrocarbonetos e sistemas levemente polares para ambas as fases líquida e de vapor.

Aqui, uma equação cúbica modificada é usada para representar o comportamento termodinâmico das fases líquida e de vapor. Melhem et al., 1989, modificaram a forma da dependência com a temperatura da equação de estado de Peng-Robinson. Estes autores mostraram que a nova forma da equação é capaz de prever equilíbrio líquido-vapor, líquido-líquido e vapor-líquido-líquido para mais de 350 sistemas binários e ternários. A equação modificada de Peng-Robinson é apresentada, a seguir, expressa em termos do fator de compressibilidade  $Z$ , sendo os parâmetros  $m$  e  $n$  dependentes da substância.

$$Z^3 + (B - 1)Z^2 + (A - 3B^2 - 2B)Z + (B^3 + B^2 - AB) = 0 \quad (3.13)$$

$$Z = \frac{PM}{\rho RT} \quad (3.13 a)$$

$$A = 0,45724 \frac{P_R}{T_R^2} \alpha \quad (3.13 b)$$

$$\alpha = \exp \left[ m(1 - T_R) + n(1 - \sqrt{T_R})^2 \right] \quad (3.13 c)$$

$$B = 0,0778 \frac{P_R}{T_R} \quad (3.13 d)$$

### 3.3 Outras funções de estado.

Outras funções de estado para estimativa de propriedades termodinâmicas como entropia, entalpia, energia interna, etc., podem ser determinadas através de propriedades residuais (Kyle, 1992). A propriedade residual é obtida subtraindo os valores das propriedades da substância, em uma pressão e temperatura especificadas, dos valores que deveriam exibir caso a substância fosse um gás ideal neste estado ( $\Delta y^* = y' - y$ ).

As propriedades residuais representam uma mudança hipotética de estado porque nem sempre é possível, para uma substância, ser, no mesmo estado de pressão e temperatura, um fluido real e um fluido ideal ao mesmo tempo. Assim, o procedimento de levar uma propriedade termodinâmica de um estado 1 ao estado 2, utilizando o conceito de propriedades residuais, pode ser esquematizado na Figura 3.1.

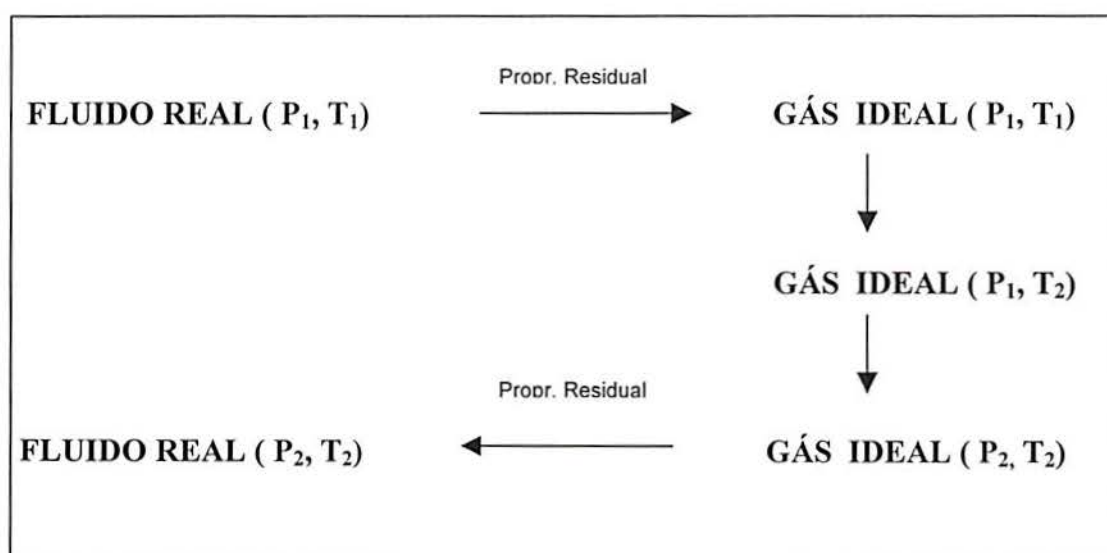


Figura 3.1 - Esquema para cálculo de propriedades termodinâmicas  
Para a entropia, a propriedade residual toma a forma

$$\Delta s^* = \int_{\infty}^{\bar{v}} \left[ \frac{R}{\bar{v}} - \left( \frac{\partial P}{\partial T} \right)_{\bar{v}} \right] d\bar{v} - R \ln Z \quad (3.14)$$

Para a energia interna, a propriedade residual é

$$\Delta u^* = \int_{\infty}^{\bar{v}} \left[ T \left( \frac{\partial P}{\partial T} \right)_{\bar{v}} - P \right] d\bar{v} \quad (3.15)$$



As equações para cálculo da entropia, da energia interna e da entalpia, obtidas por este procedimento e calculadas utilizando a Equação (3.13), são mostradas a seguir.

$$\Delta s = s - s_0 = s$$

$$s = \Delta s_0^* + a_1 \ln \frac{T}{T_0} + a_2 (T - T_0) + \frac{a_3}{2} (T^2 - T_0^2) + \frac{a_4}{3} (T^3 - T_0^3) - R^* \ln \frac{P}{P_0} - \Delta s^* \quad (3.16)$$

$$\Delta s^* = \frac{a\alpha}{2\sqrt{2}bT_C} \left( \frac{n}{\sqrt{T_R}} + m - n \right) \ln \frac{Z + \frac{(1+\sqrt{2})B}{Z}}{Z + \frac{(1-\sqrt{2})B}{Z}} - R^* \ln(Z - B) \quad (3.16 a)$$

$$\Delta u = u - u_0 = u$$

$$u = \Delta u_0^* + (a_1 - R^*) (T - T_0) + \frac{a_2}{2} (T^2 - T_0^2) + \frac{a_3}{3} (T^3 - T_0^3) + \frac{a_4}{4} (T^4 - T_0^4) - \Delta u^* \quad (3.17)$$

$$\Delta u^* = \frac{a\alpha}{2\sqrt{2}b} \left[ 1 + n\sqrt{T_R} + (m - n)T_R \right] \ln \frac{Z + \frac{(1+\sqrt{2})B}{Z}}{Z + \frac{(1-\sqrt{2})B}{Z}} \quad (3.17 a)$$

$$\Delta H = H - H_0 = H$$

$$H = \Delta H_0^* + a_1 (T - T_0) + \frac{a_2}{2} (T^2 - T_0^2) + \frac{a_3}{3} (T^3 - T_0^3) + \frac{a_4}{4} (T^4 - T_0^4) - \Delta H^* \quad (3.18)$$

$$\Delta H^* = \frac{a\alpha}{2\sqrt{2}b} \left[ 1 + n\sqrt{T_R} + (m - n)T_R \right] \ln \frac{Z + \frac{(1+\sqrt{2})B}{Z}}{Z + \frac{(1-\sqrt{2})B}{Z}} - RT(Z - 1) \quad (3.18 a)$$

Quando a avaliação de propriedades se dá em misturas de fluidos, as regras de mistura para a equação de Peng-Robinson, modificada por Melhem, 1989, alteram os parâmetros A, Equação (3.13b), e B (Equação 3.13d) para

$$A = \frac{A_m P}{R^2 T^2}, \quad (3.13b^*)$$

$$\text{onde } A_m = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N x_i x_j \sqrt{a_i a_j \alpha_i \alpha_j} (1 - k_{ij}) \text{ e}$$

$$B = \frac{B_m P}{RT} \quad (3.13d^*)$$

$$\text{onde} \quad B_m = \sum x_i b_i$$

com  $a_i$  e  $b_i$  sendo, respectivamente,  $0,45724.R^2 T_C^2 . P_C^{-1}$  e  $0,07780.R.T_C.P_C^{-1}$ . O fator  $k_{ij}$  para mistura de hidrocarbonetos leves é assumido igual a zero,  $x_i$  é a fração molar do componente e  $\alpha_i$  é calculado pela Equação (3.13.c). As funções de estado, como a entalpia, entropia, etc., continuam sendo obtidas por propriedades residuais. Para a entropia, a propriedade residual fica

$$\Delta s^* = \frac{1}{2\sqrt{2}Bm} \left( \frac{dAm}{dT} \right) \ln \left[ \frac{Z + Bm(1+\sqrt{2})}{Z + Bm(1-\sqrt{2})} \right] - R^* \ln(Z - Bm) \quad (3.19)$$

### 3.4 Despressurização isoentrópica.

Neste caso, tem-se um fluido escoando a alta pressão que, em decorrência da ruptura é colocado em contato com a atmosfera sofrerá um processo de despressurização rápida com pouca troca de energia com o meio. Uma possibilidade de tratar o comportamento do sistema é a consideração de que a despressurização se dê com entropia constante. Assim sendo, o procedimento de despressurização isoentrópica consistiu em resolver um sistema de equações, formado pela Equação (3.16) igualada a zero e pela Equação (3.13). Na região à esquerda do ponto crítico, passando pela zona de subresfriamento, até a linha de saturação, a Equação (3.13) fornece duas raízes complexas e uma raiz real. Quando a Equação (3.13) começa a fornecer três raízes reais, tem-se a indicação de que se chegou à região bifásica. Este procedimento é descrito em Kyle, 1992.

Na região bifásica, a fração volumétrica de vapor formado, foi calculada pela seguinte equação.

$$x_v = \frac{s - s_L}{s_G - s_L} \quad (3.20)$$

Também foi utilizada a equação de Clapeyron para determinar o incremento de temperatura na região bifásica.

$$\frac{dP}{dT} = \frac{\bar{s}_G - \bar{s}_L}{\bar{v}_G - \bar{v}_L} \quad (3.21)$$

A massa específica da mistura líquido-vapor foi calculada pela Equação (2.7) para um processo de despressurização isoentrópica. A Figura 3.2 ilustra este procedimento. Esta curva foi obtida com eteno, que inicialmente, se encontrava a 10,13 MPa e 298,15 K.

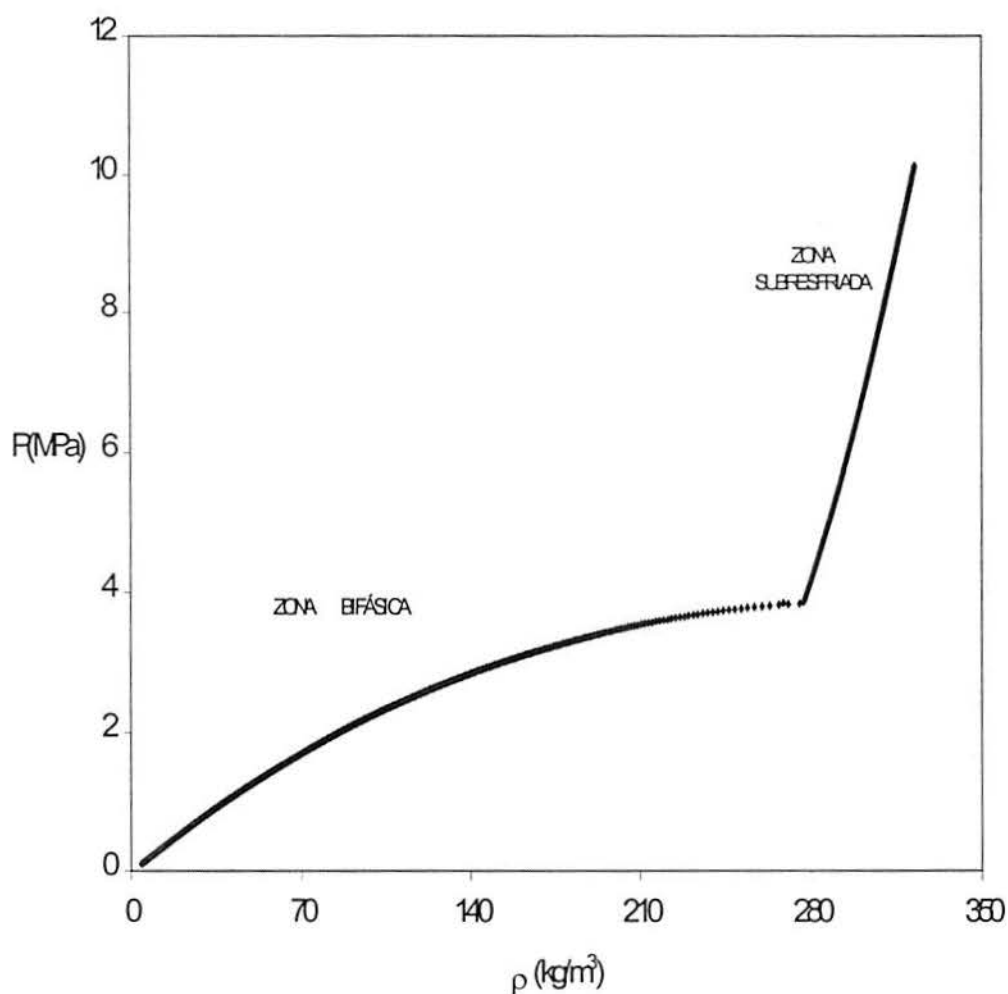


Figura 3.2 – Despressurização isoentrópica do eteno utilizando a equação de Peng-Robinson modificada por Melhem et al., 1989.

A função  $P^*(\rho)$ , mostrada na Figura 3.2, resultado do procedimento recém descrito, pode ser representada por um polinômio ajustado aos pontos calculados. Dado que o comportamento da função é relativamente suave em cada uma das regiões delimitadas por  $\rho_{SAT}$ , optou-se por um

ajuste polinomial de segunda ordem, com coeficientes distintos para cada uma das regiões mencionadas e apresentadas na Equação 3.22.

$$P^*(\rho) = \begin{cases} c_1 + c_2\rho + c_3\rho^2, & \rho \geq \rho_{SAT} \\ c_4 + c_5\rho + c_6\rho^2, & \rho < \rho_{SAT} \end{cases} \quad (3.22)$$

Através deste ajuste, a relação  $(\rho, P, T)$  obtida durante a despressurização da substância e calculadas pela solução do sistema de equações formado pela Equação (3.16) igualada a zero e pela Equação (3.13), pode ser representada pelo par de pontos  $(\rho, P^*)$ . Esta aproximação será bastante útil e sua aplicação será justificada na próxima seção.

### 3.5 Modelo adotado.

O modelo de três equações apresentado através das Equações (3.6) a (3.8), juntamente com a equação de estado, Equação (3.13), pode ser reduzido para um sistema mais simples. Com a aproximação adotada na Seção 3.4, pode-se representar este modelo por um sistema de duas equações.

Também será adotado que a tubulação tem área e forma de seção constante, que não há reação química durante o escoamento ( $P_Q = 0$ ), que o processo será conduzido isoentropicamente e sendo as perdas por atrito (cujo fator de atrito é o mesmo utilizado em Mahgerefteh et al., 1999) são dadas por

$$\frac{\partial P}{\partial x} I_{fr} = \frac{f}{2D} \frac{G^2}{\rho} \quad (3.23)$$

$$\text{Re} \leq 2000$$

$$f = \frac{64}{\text{Re}} \quad (3.23 \text{ a})$$

$$\text{Re} > 2000$$

$$f = 4 \left\{ 0,001375 \left[ 1 + \left( 20000 \frac{\varepsilon}{D} + \frac{10^6}{\text{Re}} \right)^{\frac{1}{3}} \right] \right\} \quad (3.23 \text{ b})$$



Assim, o modelo toma a forma:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial G}{\partial x} = 0 \quad (3.6)$$

$$\frac{\partial G}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{G^2}{\rho} + P^*(\rho) \right) + \frac{f}{2D} \frac{G^2}{\rho} = 0 \quad (3.24)$$

O modelo atual reduz bastante as não-linearidades que estavam presentes no sistema anterior, Equações (3.6) a (3.8). Além disto, não é necessário se fazer uso do balanço de energia, Equação (3.8), pois a temperatura pode ser calculada paralelamente ao sistema, através de uma função  $T^*(\rho)$ , pois assim como a pressão, a temperatura também pode ser ajustada em função da massa específica, através de um polinômio.

### 3.6 Tratamento numérico do modelo.

O esquema numérico adotado foi o método explícito de Godunov, 1959, que também foi utilizado por Seynhaeve et al., 1994. Segundo estes autores, o esquema de Godunov é uma poderosa ferramenta para computação de escoamentos de fluidos. Como os esquemas de Lax-Wendroff, o esquema de Godunov tenta preservar as propriedades das leis de conservação das equações de balanço durante a discretização e o avanço no tempo e no espaço, (Ames, 1992). Na Figura 3.3, o esquema de Godunov é ilustrado.

A aplicação do método de Godunov é conduzida através da integração da Equação (3.9) em um domínio retangular  $P(\Delta x, \Delta t)$ , como mostrado na Figura 3.4.

$$\iint_P \left( \frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F(U)}{\partial x} \right) = \iint_P V(U) \quad (3.25)$$

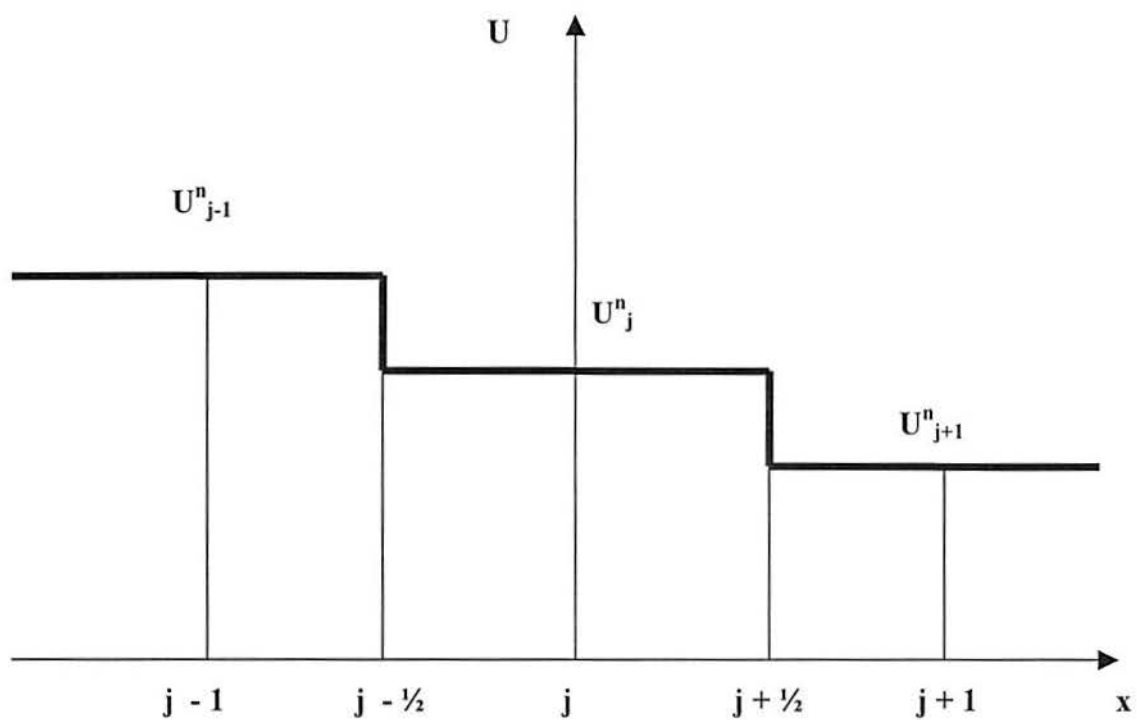


Figura 3.3 – Aproximação de Godunov da solução ao tempo  $n$ .

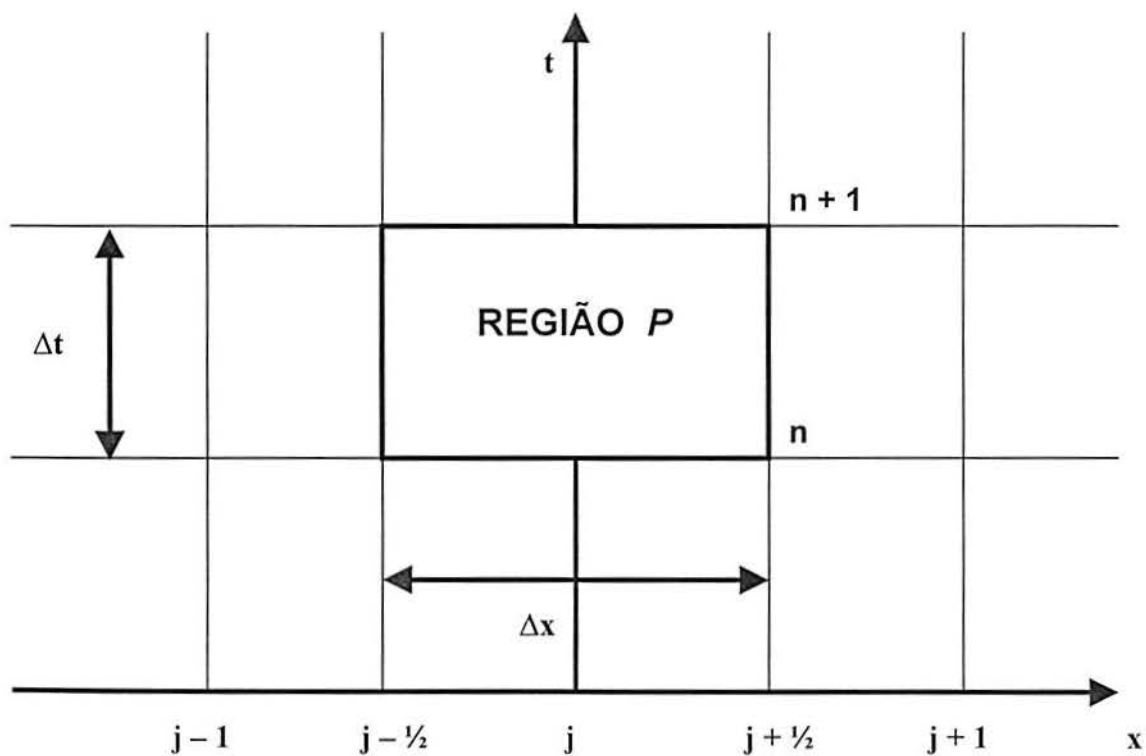


Figura 3.4 – Localização da região  $P$  no gráfico.

O resultado da integração fornece a seguinte equação:

$$U_j^{n+1} = U_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left( F_{j+\frac{1}{2}} - F_{j-\frac{1}{2}} \right) + V(U_j^n) \Delta t \quad (3.26)$$

No esquema de Godunov, considera-se que a melhor estimativa do valor  $F$  no lado vertical do retângulo  $P$  é

$$F_{j\pm\frac{1}{2}} = F \left( U_{j\pm\frac{1}{2}}^{n+1} \right) \quad (3.27)$$

Onde os valores aproximados de  $U$  são dados por

$$U_{j+\frac{1}{2}}^{n+1} = \frac{1}{2} (U_{j+1}^n + U_j^n) - \frac{\Delta t}{\Delta x} [F(U_{j+1}^n) - F(U_j^n)] + \frac{1}{2} [V(U_{j+1}^n) + V(U_j^n)] \Delta t \quad (3.28 a)$$

$$U_{j-\frac{1}{2}}^{n+1} = \frac{1}{2} (U_j^n + U_{j-1}^n) - \frac{\Delta t}{\Delta x} [F(U_j^n) - F(U_{j-1}^n)] + \frac{1}{2} [V(U_j^n) + V(U_{j-1}^n)] \Delta t \quad (3.28 b)$$

A solução deste problema a cada intervalo de tempo requer a determinação das direções características  $\lambda_k$ , mostradas na Figura 3.5. Valores de  $\lambda_k$  são os autovalores do jacobiano de  $F(U)$ , dados pela condição

$$J(U) = \frac{\partial F(U)}{\partial U}, \quad \det [J(U) - \lambda I] = 0 \quad (3.29)$$

Onde  $J(U)$  representa uma matriz onde seus elementos são dados pelas derivadas parciais de  $F(U)$ , (Seynhaeve et al., 1994). Para o modelo em questão - Equações (3.6) e (3.22) - o jacobiano fica dado como

$$J(U) = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ \frac{\partial \mathbf{P}^*(\rho)}{\partial \rho} - \left( \frac{G}{\rho} \right)^2 & 2 \left( \frac{G}{\rho} \right) \end{bmatrix} \quad (3.30)$$

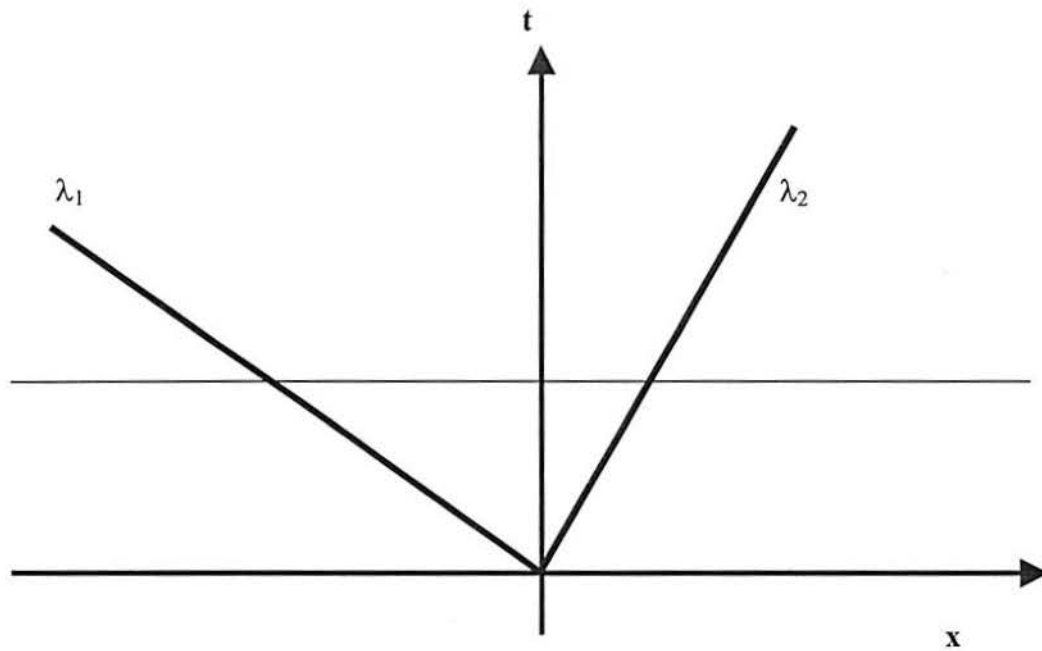


Figura 3.5 – Direções características.

e as direções características são

$$\lambda_1 = \frac{G}{\rho} + \sqrt{\frac{\partial P^*(\rho)}{\partial \rho}} \quad (3.31)$$

$$\lambda_2 = \frac{G}{\rho} - \sqrt{\frac{\partial P^*(\rho)}{\partial \rho}} \quad (3.32)$$

Aqui cabe uma observação. A expressão  $\frac{\partial P^*(\rho)}{\partial \rho}$  advinda de um ajuste polinomial tem o mesmo valor que

$$\left( \frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_s$$

Se o escoamento fosse de um gás (monofásico, portanto) a derivada parcial acima, seria o quadrado da velocidade do som para esta substância.

Com relação ao fato de evitar alguma perda de informação física no desenvolvimento do esquema de Godunov, 1959, ou seja, para bem caracterizar a propagação da pressão e do fluxo de massa, é necessário impor que

$$\Delta t \cdot \max(|\lambda_k|) \leq \Delta x \quad (3.33)$$



Isto conduz para a definição do índice de Courant, IC (citado em Seynhaeve et al., 1994), onde

$$IC = \frac{c \cdot \Delta t}{\Delta x}, \quad c = \max(|\lambda_k|) \quad (3.34)$$

Nestas bases, a condição Courant-Friedrichs-Lewy (CFL, também citada em Seynhaeve et al., 1994), pode ser escrita como

$$IC \leq 1 \quad (3.35)$$

A Figura 3.6 ilustra esta condição.

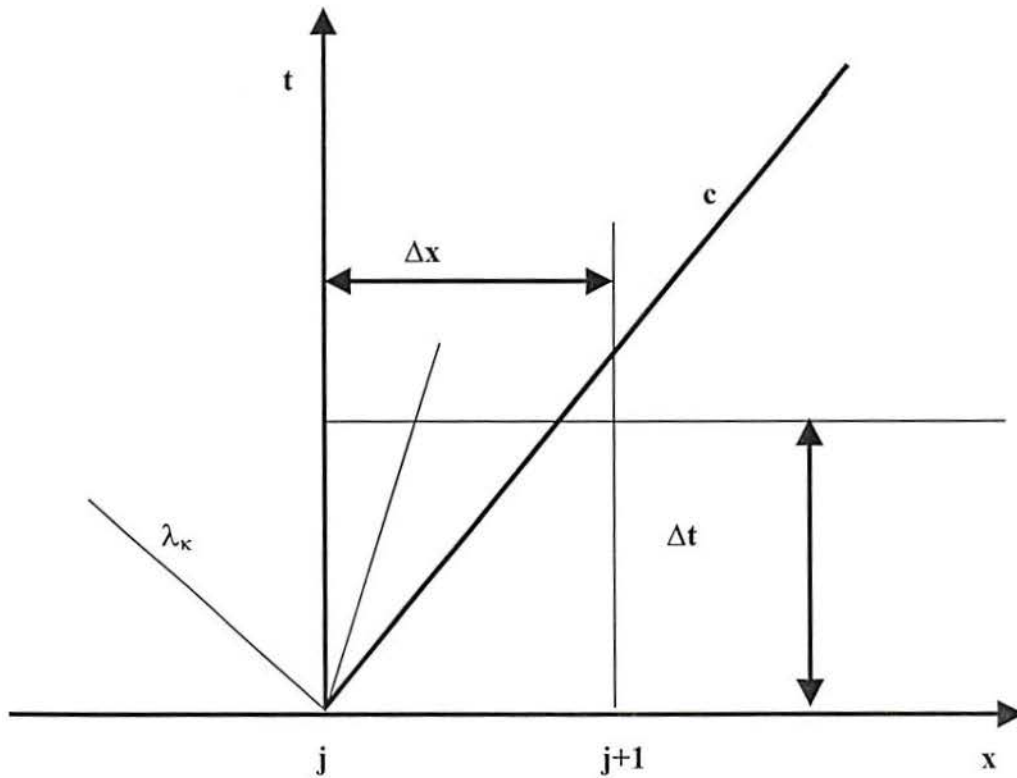


Figura 3.6 – Interpretação gráfica da condição CFL.

### 3.7 Equação de estado para líquidos subresfriados

Para cálculo de propriedades de líquidos saturados Reid et al., 1987, sugere a utilização da equação de Hankinson e Thompson, denominada de “COSTALD” (“Corresponding STates Liquid Density”), que tem a seguinte forma

$$v_s = v^* [v_R^0 (1 - \omega_{SRK} v_R^\phi)] \quad (3.36)$$

$$v^* = \frac{RT_C}{P_C} (b_1 + b_2 \omega + b_3 \omega^2) \quad (3.36a)$$

$$v_R^0 = 1 + a(1 - T_R)^{\frac{1}{3}} + b(1 - T_R)^{\frac{2}{3}} + c(1 - T_R) + d(1 - T_R)^{\frac{4}{3}} \quad (3.36b)$$

$$v_R^\phi = \frac{(e + fT_R + gT_R^2 + hT_R^3)}{T_R - 1,00001} \quad (3.36c)$$

onde  $b_1, b_2, b_3, a, b, c, d, e, f, g, h$  são constantes específicas do fluido,  $P_C$  e  $T_C$  são as propriedades críticas,  $R$  é a constante dos gases  $\omega$  o fator acêntrico,  $T_R$  é a temperatura reduzida e  $v_s$  é o volume molar do líquido saturado.

Para líquidos pressurizados, existe a adaptação da equação “COSTALD” (3.36) denominada “COSTALP”, que tem a forma

$$v = v_s \left( 1 - C \ln \frac{B + P}{B + P_s} \right) \quad (3.37)$$

$$B = P_C \left[ -1 + b_4(1 - T_R)^{\frac{1}{3}} + b_5(1 - T_R)^{\frac{2}{3}} + b_6(1 - T_R) + b_7(1 - T_R)^{\frac{4}{3}} \right] \quad (3.37a)$$

$$P_s = \text{Exp} \left( b_8 + \frac{b_9}{T + b_{10}} \right) \quad (3.37b)$$

onde  $v_s$  é o volume molar do líquido saturado calculado pela Equação (3.36),  $v$  é o volume molar do líquido comprimido,  $P_s$  é a pressão de saturação (calculada pela equação de Antoine), as

constantes  $b_4$  a  $b_{10}$  e  $C$  são tabeladas para o fluido,  $T_R$  é a temperatura reduzida e  $P_C$  é a pressão crítica

A entropia pode ser calculada através da seguinte expressão.

$$ds = \left( \frac{\partial s}{\partial T} \right)_P dT + \left( \frac{\partial s}{\partial P} \right)_T dP \quad (3.38)$$

que, quando resolvida fica

$$\Delta s = \int \frac{C_P}{T} dT - \int \left( \frac{\partial v}{\partial T} \right)_P dP \quad (3.39)$$

### 3.8 Viscosidade de gases e líquidos

Reid et al., 1987, sugere as seguintes expressões para o cálculo da viscosidade de líquidos:

$$\mu = \frac{10^{\left( \text{VISB} \left( \frac{1}{T} \right) - \left( \frac{1}{\text{VISTO}} \right) \right)}}{1000} \quad (3.40)$$

e para gases

$$\mu = \frac{1}{100000000} \left[ \frac{33,3(28T_C)^{D(T_R)}}{v_C^{\frac{2}{3}}} \right] \quad (3.41)$$

$$D(T_R) = \frac{1}{2} \left( (1,058T_R)^{\left( 0,645 - \frac{0,261}{1,9T_R^{0,3} \log(1,9T_R)} \right)} \right) \quad (3.41a)$$

onde  $VISB$ ,  $VISTO$  são constantes do fluido  $v_C$  e  $T_C$  são propriedades críticas e  $T_R$  é a temperatura reduzida.

Na região bifásica, a viscosidade é calculada de forma ponderal, utilizando a fração de vaporização da substância ou da mistura.

### 3.9 Fatores para validação

Os resultados que se obtêm com modelos matemáticos precisam ser comparados com valores de medidas experimentais obtidos dentro da faixa de validade para a qual o modelo pode ser aplicado. A comparação pode ser avaliada com o uso de critérios de validação, em geral na forma de índices estatísticos de validação. Nesta seção, será descrita a sistemática utilizada para avaliar a comparação de resultados obtidos com o modelo versus os resultados experimentais disponíveis. Hanna et al., 1991, descrevem índices estatísticos para validação de modelos e, alguns deles, serão utilizados neste texto. Os principais índices mencionados serão agora descritos.

*Quadrado do Erro Médio Normalizado* (“*Normalized Mean Square Error*”): informa sobre todos os desvios entre valores dos resultados obtidos com modelos ( $C_m$ ) e os valores observados ( $C_o$ ). É um parâmetro estatístico adimensional e, sendo que valores baixos, próximos de zero, são uma indicação que os valores obtidos com o uso do modelo aproximam-se bem dos valores experimentais.

$$NMSE = \frac{\overline{(C_m - C_o)^2}}{C_m C_o} \quad (3.42)$$

*Fração de Dados FA2*: razão dos valores do modelo pelos observados. É desejável que FA2 fique entre 0,5 e 2.

$$FA2 \Rightarrow 0,5 \leq \frac{C_m}{C_o} \leq 2 \quad (3.43)$$

*“Fracional Bias”*: informa a tendência do modelo de sobrestimar ou subestimar os valores observados. O valor ótimo é zero.

$$FB = 2 \frac{C_m - C_o}{C_m + C_o} \quad (3.44)$$



### 3.10 Linguagem de programação e softwares utilizados.

Os programas de computador foram desenvolvidos no FORTRAN POWERSTATION 4.0<sup>TM</sup> e, como softwares de apoio, foram utilizados o MATHEMATICA 2.0<sup>TM</sup>, MAPLE V RELEASE 5<sup>TM</sup> e EXCEL 97<sup>TM</sup>.

No MATHEMATICA 2.0<sup>TM</sup>, foi realizada a despressurização isoentrópica, resolvendo numericamente o sistema de equações formado pelas Equações (3.13) e (3.16). No anexo, estão impressos os comandos utilizados para a realização desta etapa.

Já os dados transientes foram obtidos através de programação no FORTRAN POWERSTATION 4.0<sup>TM</sup>, através do tratamento das Equações (3.6) e (3.22), utilizando-se o esquema de Godunov, 1959, cujo programa está em anexo. As condições de contorno utilizadas foram conseguidas através da solução do problema estacionário, tratando as Equações (3.6) e (3.22) no, MAPLE V RELEASE 5<sup>TM</sup> e comparando os resultados em planilha eletrônica, utilizando para isto o EXCEL 97<sup>TM</sup>, software que também foi utilizado para realizar os ajustes polinomiais e confeccionar os gráficos das variáveis de estudo.

#### 4. RESULTADOS

Os resultados que serão mostrados, a seguir, foram obtidos da solução numérica do sistema de equações, formado pela Equação (3.6), Equação (3.24) e pela equação de estado de Peng-Robinson modificada por Melhem, representada por um ajuste polinomial e mostrada através da Equação (3.22). Inicialmente, serão apresentados os resultados da modelagem de escoamento crítico bifásico no estado estacionário para o caso de estudo de ruptura total do duto que conduz o fluido pressurizado e para o caso de escoamento crítico advindo de um furo no duto. Na seqüência, serão mostrados os resultados da modelagem transiente que foram obtidos com a utilização do esquema de Godunov descrito na seção 3.6.

Além da apresentação dos resultados numéricos, outros dois aspectos serão discutidos nesta seção: a avaliação da hipótese isoentrópica, utilizada para obtenção do ajuste polinomial descrito na Equação (3.22), e a influência do isolamento térmico dos dutos, onde serão comparados os resultados de uma modelagem que trata a depressurização isoentropicamente (caso com isolamento térmico) com o caso onde a depressurização ocorre politropicamente (caso sem isolamento térmico).

E para finalizar, serão apresentados os resultados de validação da modelagem adotada utilizando para isto o inventário do acidente chamado de “Piper-Alpha”. Este acidente trata-se de uma ruptura total de um duto submarino de 54 km de extensão que transportava gás natural a uma pressão de 11,7 MPa. Este inventário também foi utilizado por outros autores como Richardson e Saville, 1991 e por Mahgerefteh et al., 1999, visando a validação de suas modelagens. E, também, além da comparação com os resultados do inventário do acidente de “Piper-Alpha”, os resultados do modelo serão comparados com os resultados da modelagem dos autores Mahgerefteh et al., 1999, que utilizaram um modelo chamado de CNGS-MOC baseado na solução das equações do balanço de momento, massa e energia utilizando o Método das Características (que pode ser encontrado em Ames, 1992). A comparação entre os modelos servirá para mostrar o consumo de tempo de computação envolvida, já que o modelo denominado CNGS-MOC tem um consumo de tempo computacional abaixo dos existentes até então, segundo os seus autores. A validação também utilizará testes estatísticos desenvolvidos e apresentados em Hanna et al., 1991.

#### 4.1 Regime estacionário

O modelo desenvolvido para o regime estacionário foi utilizado para obtenção de resultados de alguns casos de interesse prático. Em um primeiro momento, considerou-se o caso relativamente simples, correspondente ao estado estacionário resultante da situação onde houvesse uma ruptura total da tubulação a uma distância  $L$  de uma dada fonte produtora, onde as condições de pressão e temperatura fossem mantidas constantes. Neste caso, após algum tempo, o sistema atingiria o estado estacionário com vazão constante. E em um segundo momento, um outro cenário de interesse prático é a perda de contenção de uma tubulação devido a uma perfuração no duto a uma distância  $L$  da fonte produtora, onde se dá o escoamento e onde as condições de pressão e da temperatura também são mantidas constantes.

##### 4.1.1 Perda de contenção por ruptura total de tubulação isolada

Em uma ruptura total de tubulação, o regime estacionário do modelo vai permitir definir qual o fluxo de massa crítico que se estabelecerá em uma descarga para a atmosfera, a uma distância  $L$  da fonte de pressão do fluido. O problema que se resolve, no caso estacionário, corresponde ao limite que se obtém quando o tempo vai para o infinito, mantidas as condições fixas no ponto intacto, ou seja, no ponto onde a coordenada dimensional é nula ( $x = 0$ ). Assim, a Equação (3.6) e a Equação (3.22) ficam, respectivamente

$$G = \text{constante} \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{G^2}{\rho} + P^*(\rho) \right] + \frac{f}{2D} \frac{G^2}{\rho} = 0 \quad (4.2)$$

Integrando-se a Equação (4.2) obtém-se

$$G = \sqrt{\frac{2 \int_{p_2}^{p_1} \rho dP^*}{2 \ln \frac{\rho_1}{\rho_2} + f \frac{L}{D}}} \quad (4.3)$$

Para se determinar o fluxo de massa crítico, foi maximizado o fluxo de massa com relação à pressão, procedimento adotado por Moody, 1966, na descrição de vários modelos e no trabalho de vários autores, como Elias e Lellouche, 1994 e Khajehnajafi e Shinde, 1994. Assim sendo,  $G$  será máximo quando

$$\frac{\partial G}{\partial p} = 0 \quad (4.4).$$

A Figura 4.1 mostra os resultados obtidos para a despressurização do eteno, devido à perda de contenção simulada, ocorrendo a uma distância de 5000 m da fonte de pressurização, mostrando que o fluxo de massa passa por um máximo, quando relacionado com a variação de pressão. Este máximo, no ponto de ruptura, ocorreu a um valor de pressão de 200 kPa, uma temperatura de 182 K e o fluxo de massa gerado de  $1205 \text{ kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ . Este valor, em termos de vazão mássica, representa uma taxa de  $2,4 \text{ kg.s}^{-1}$  de eteno sendo jogado na atmosfera. Nestas condições, o eteno é uma mistura bifásica contendo 58 % de vapor, em base volumétrica. As condições iniciais de pressão e temperatura foram fixadas em 7 MPa e 298 K, condições estas bastante comuns em transporte de eteno em dutos. Adotou-se tubulação com um diâmetro de 0,05 m e o fator de atrito de Fanno mantido constante e igual a 0,003, valor indicado em Perry, 1980.

A fixação do valor de fator de atrito de Fanno igual a 0,003 pode não ser satisfatória para o cálculo do fluxo de massa crítico, como será visto a seguir.

Na Tabela 4.1, estão colocados os valores de fluxo de massa em função da distância  $L$ , do diâmetro  $D$  e da pressão inicial  $P_0$ , comparando-se o valor fixado por Perry, 1980, para o fator de atrito calculado pelas Equações (3.23 a) e (3.23 b), com o valor do número de Reynolds sendo determinado de forma praticamente instantânea, utilizando-se para isto o valor de fluxo de massa determinado na iteração imediatamente anterior.

Analisando a Tabela 4.1, percebe-se que a fixação de um valor de coeficiente de atrito pode levar à diferenças significativas no cálculo do fluxo de massa crítico. Esta diferença aumenta com a diminuição do valor do diâmetro, fato este que realmente deveria ser esperado, pois o quanto menor o diâmetro do duto, maior deverá ser a perda de carga associada.



Tabela 4.1 - Fluxo de massa crítico ( $G_C$ ) de eteno, determinado em várias condições de pressão inicial, distância da fonte e diâmetros de tubulação utilizando, para o fator de atrito, um valor fixo (f cte)\* ou utilizando um valor variável (f var.)\*\*.

$P_0(\text{MPa})$	10								
$D(\text{m})$	0,05			0,10			0,15		
$L(\text{m})$	5000	10000	15000	5000	10000	15000	5000	10000	15000
$G_C(\text{kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1})^*$	1895	1341	1095	2678	1895	1548	3276	2320	1895
$G_C(\text{kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1})^{**}$	1501	1061	866	2298	1627	1329	2938	2081	1700
$P_0(\text{MPa})$	9								
$D(\text{m})$	0,05			0,10			0,15		
$L(\text{m})$	5000	10000	15000	5000	10000	15000	5000	10000	15000
$G_C(\text{kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1})^*$	1727	1222	998	2439	1727	1411	2982	2113	1727
$G_C(\text{kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1})^{**}$	1337	945	771	2050	1450	1184	2623	1857	1517
$P_0(\text{MPa})$	7								
$D(\text{m})$	0,05			0,10			0,15		
$L(\text{m})$	5000	10000	15000	5000	10000	15000	5000	10000	15000
$G_C(\text{kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1})^*$	1206	854	697	1700	1206	985	2077	1474	1206
$G_C(\text{kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1})^{**}$	933	659	537	1429	1011	826	1827	1295	1058

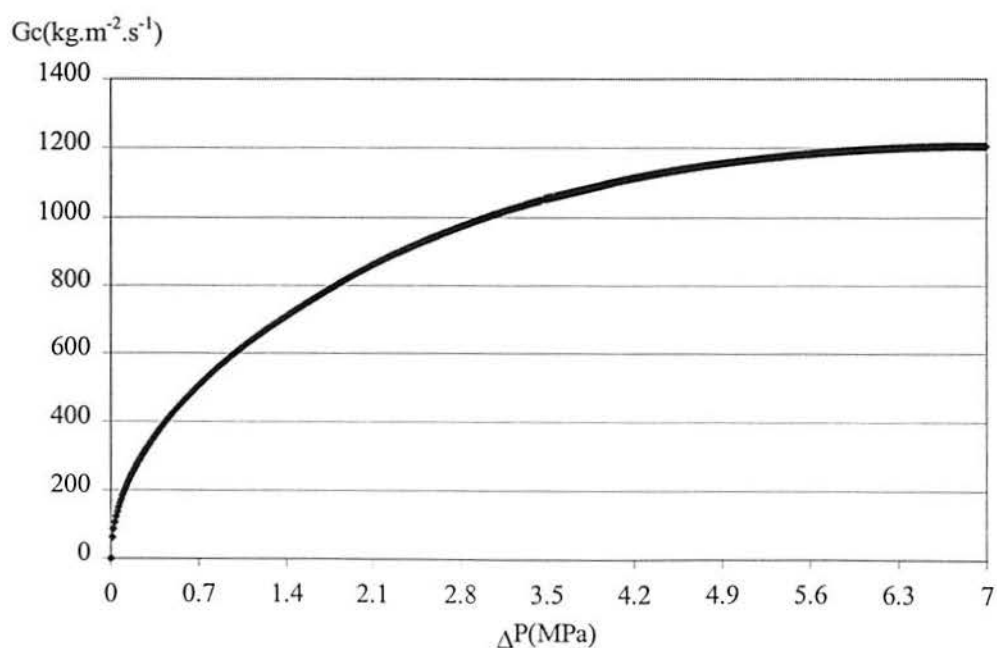


Figura 4.1 - Maximização do fluxo de massa  $G$  de eteno com relação à variação de pressão.

Constata-se, ainda analisando a Tabela 4.1, que quanto mais próximo do ponto de estagnação (fonte da pressurização), maior o valor em que o fluxo de massa é maximizado. O valor do fluxo de massa crítico, naturalmente, cresce com o aumento do valor do diâmetro da tubulação e com o aumento do valor da pressão no ponto de estagnação. A discretização, com relação à pressão, necessária para a maximização do fluxo de massa crítica, foi conduzida com um intervalo de 10 kPa (0,1 atm) na região de líquido subresfriado e de 1 kPa (0,01 atm) na região bifásica. Esta diferença na discretização se deve ao fato de que na região de líquido subresfriado a variação da massa específica é praticamente linear com relação à pressão, possibilitando que se possa avaliar uma massa específica média para levantar o valor da integral presente na Equação (4.3). Já na região bifásica, o incremento na pressão é mais suave, pois, supondo que a massa específica média seja dada pela Equação (2.18), a relação não é linear, Figura (3.2), o que poderia levar a um desvio muito grande no cálculo da integral da Equação (4.3). Conduta idêntica foi utilizada na avaliação do fluxo de massa de outros compostos, como propano, água e mistura de fluidos, como aquela presente no gás natural.

Na Figura 4.2, relaciona-se o fluxo de massa crítico de eteno com a distância do ponto de ruptura em uma tubulação de 0,1 m de diâmetro, ilustrando o que foi descrito no parágrafo anterior.

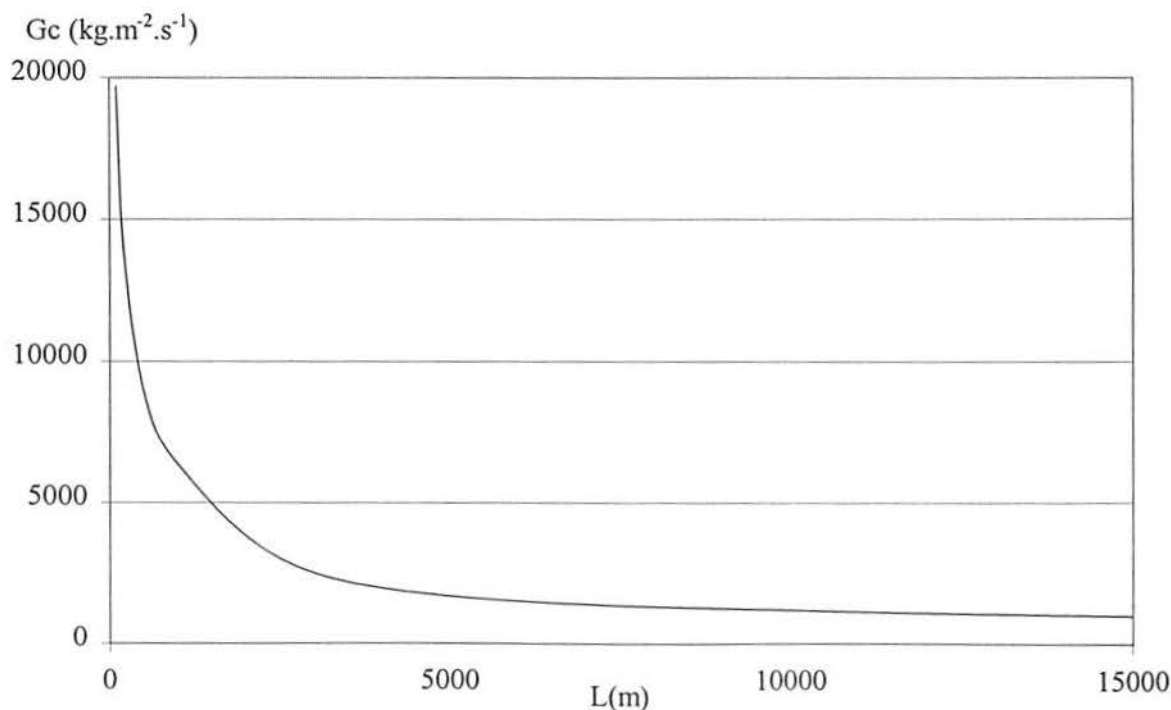


Figura 4.2 - Fluxo de massa crítico de eteno em função da distância ao ponto de ruptura.



O fluxo de massa varia de forma a diminuir com a distância do ponto de ruptura. Em pontos mais próximos da fonte de pressurização, como, por exemplo, na distância de 100 m, o fluxo crítico ocorre em pressões próximas da saturação e tem-se, nestas situações, o fluido sendo liberado para a atmosfera totalmente na fase líquida, não ocorrendo, portanto, a formação de escoamento bifásico. Este comportamento é esperado, haja vista os resultados experimentais mostrados em Pilz e van Herck, 1976. Fisicamente, pode-se entender o fenômeno de maneira simples. Enquanto a queda de pressão na tubulação não for suficiente para fazer com que a pressão em um dado ponto não caia abaixo da pressão de saturação nas condições da ruptura, não haverá mudança de fase ou formação de mistura bifásica. Resultados semelhantes foram obtidos para outras substâncias como o propano.

Quando se tem escoamento crítico onde ocorre mudança de fase, não necessariamente observa-se fluidos escoando na velocidade do som, como ocorre no caso de gases.

O uso de uma equação de estado robusta, com boa performance para avaliar relações PVT para líquidos, levou a resultados para o fluxo de massa crítico que podem ser satisfatórios. Assim, por exemplo, quando se utiliza o procedimento descrito para obter-se a taxa de descarga resultante de uma ruptura total na distância de 100 m de um reservatório em uma tubulação de 0,1 m de diâmetro contendo propano líquido a 10 MPa, o valor obtido para a pressão onde o fluxo de massa crítico ocorre, corresponde à pressão de saturação do propano líquido na temperatura de 279 K, ou seja, aproximadamente 560 kPa. A escolha do propano para tratar deste aspecto, deve-se ao fato de se ter disponível o valor da velocidade do som para o propano líquido. O fluxo de massa crítico de propano, encontrado nestas condições, foi de  $19678 \text{ kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ . Este valor corresponderia a uma velocidade de  $38 \text{ m.s}^{-1}$  para o líquido no ponto de ruptura. O valor maximizado é bem abaixo da velocidade do som para o propano, nas condições de líquido saturado, que corresponde a  $786,2 \text{ m.s}^{-1}$ , valor fornecido no “Yellow Book”, 1997. Mesmo utilizando uma equação de estado mais adequada para líquidos pressurizados, como a Equação (3.37), este fato ainda ocorre. O fluxo de massa crítico calculado para estas condições, utilizando a Equação (4.3), alcançou o valor de  $20241 \text{ kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ , correspondendo a um valor de velocidade de líquido, no ponto de ruptura, de aproximadamente  $39 \text{ m.s}^{-1}$ . Este valor é bem abaixo do valor da velocidade do som do propano, mas para a variação de pressão envolvida, 9,5 MPa, se for realizado um balanço de energia no ponto de ruptura, utilizando Bernoulli, por exemplo, chega-se a um valor próximo de  $200 \text{ m.s}^{-1}$ , que também é bem abaixo do valor da velocidade do som do propano nas condições utilizadas. Ou seja, com diferença de pressão de 9,5 MPa, ainda se está muito longe de

velocidades sônicas para o caso de líquidos. Este fato pode mostrar que na fase líquida o máximo de fluxo crítico encontrado esteja apenas relacionado com o fluido começar a sua evaporação na sua pressão de saturação. A partir daí, o fluxo de massa tende a se reduzir, pois a massa específica passa a ser ponderada entre a fase líquida e a fase de vapor. Assim, o maior valor de fluxo de massa que será maximizado será justamente aquele calculado quando a pressão atinge ponto de líquido saturado.

Para o caso de escoamento bifásico no ponto de ruptura, esta metodologia se mostra bastante satisfatória e maiores detalhes serão tratados na seção de validação do modelo, que está apresentado mais adiante no texto.

#### 4.1.2 Perda de contenção através de um furo na tubulação

Para descargas de fluidos através de furos em dutos, faz-se necessário a introdução do coeficiente de descarga,  $C_D$ , que é a razão da vazão mássica real pela vazão mássica teórica. O coeficiente de descarga, segundo o Yellow Book, 1997, para pequenos furos, deve ter o valor de 0,62, valor este também indicado por Fauske, 1971. Assim sendo, a equação de balanço de momento no duto, entre o ponto de pressão constante  $P_0$  e ponto de pressão de estagnação  $P_1$  (Figura 4.3) próximo da ruptura, é dado por

$$P_0 + \frac{G_0^2}{2\rho_0} = P_1 + \frac{G_1^2}{2\rho_1} + f \frac{L}{D} \frac{G_1^2}{2\rho_1}. \quad (4.8)$$

Na ruptura

$$P_1 = P_R + \frac{G_R^2}{2\rho_R}. \quad (4.9)$$

Isolando  $G_R$

$$G_R = \sqrt{2\rho_R(P_1 - P_R)} \quad (4.10)$$



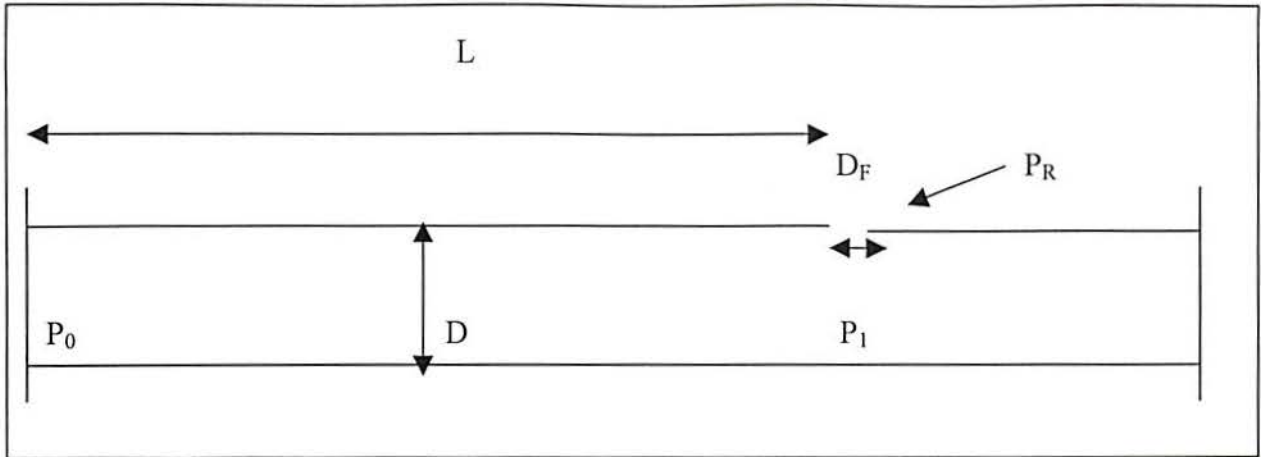


Figura 4.3 – Esquema para ilustração de descarga através de um furo em um trecho da tubulação

Introduzindo o Coeficiente de Descarga,  $C_D$ , a vazão de massa real será o produto do  $C_D$  pela vazão de massa teórica calculada pelo produto do fluxo, encontrado pela Equação (4.10), pela área da seção do furo. Assim, a vazão mássica que deixa a tubulação pelo furo, é dada por

$$\dot{m} = C_D \cdot A_R \sqrt{2\rho_R(P_1 - P_R)} \quad (4.11)$$

Para exemplo de determinação do fluxo de massa crítico através de um furo, utilizou-se eteno, que, inicialmente, escoava com uma vazão de  $10 \text{ kg.s}^{-1}$ , com uma pressão de  $10,1 \text{ MPa}$  e uma temperatura de  $298 \text{ K}$ . Admitiu-se um diâmetro de furo de  $0,01 \text{ m}$  em uma tubulação de diâmetro de  $0,1 \text{ m}$ . Os valores dos diâmetros do furo e da tubulação estabelecem que a área do furo da tubulação vale  $1 \%$  da área de seção do duto. E a distância do ponto da fonte de pressão constante até o furo foi de  $1000 \text{ m}$ .

Inicialmente, mantendo o fluxo de massa constante, determina-se o valor da pressão  $P_I$  através da Equação (4.8), que é a pressão que o fluido tem após escoar  $1000 \text{ m}$  e ter perdido, com o atrito na parede do duto, uma fração da pressão inicial. Com esta pressão  $P_I$  igual a  $3,3 \text{ MPa}$ , maximiza-se a Equação (4.11), com relação à pressão  $P_R$ . O valor de vazão mássica, assim encontrado,  $0,74 \text{ kg.s}^{-1}$ , é adicionado ao valor de  $10 \text{ kg.s}^{-1}$ , totalizando  $10,74 \text{ kg.s}^{-1}$  e novamente se insere este valor na Equação (4.8) para calcular o novo valor de  $P_I$ , que vale  $3,4 \text{ MPa}$ . Com este valor, novamente maximiza-se a Equação (4.11), com relação à pressão de ruptura e chega-se ao valor de  $0,76 \text{ kg.s}^{-1}$ , que será novamente somado aos  $10 \text{ kg.s}^{-1}$  e que se repete na seguinte iteração. O processo é bastante convergente, com uma variação de  $10^{-5}$  entre os valores de vazão de massa entre a iteração final e a anterior. A pressão final no ponto de ruptura assumiu o valor

de 1,8 MPa. Nestas condições, o eteno é uma mistura bifásica com fração molar de vapor de 39 %.

Uma sugestão para realização do cálculo do fluxo de massa crítico através de um furo é a utilização de planilha eletrônica. Utilizando-se a planilha Excel<sup>TM</sup>, que possui uma ferramenta chamada "Solver", é possível maximizar funções matemáticas a partir de variáveis que lhe façam parte. Como pode-se expressar a massa específica em função da pressão, através do ajuste polinomial já mostrado para o eteno, o valor do fluxo de massa crítico no ponto de ruptura pode ser calculado quase que instantaneamente.

## 4.2 Regime transiente

### 4.2.1 Considerações gerais

A modelagem do transiente de um escoamento de um fluido supercrítico, que em função, de um vazamento para atmosfera, venha a desenvolver, no ponto de ruptura, um escoamento crítico bifásico, é uma tarefa árdua e desafiadora. Nestas circunstâncias, quando há a perda de contenção devido a uma falha de um acessório de linha ou uma ruptura total da tubulação, por exemplo, a variação da ordem de grandeza das variáveis envolvidas é considerável. Mesmo utilizando um esquema numérico robusto, voltado para a solução de equações diferenciais parciais de primeira ordem (hiperbólicas), como é o esquema de Godunov, 1959, a modelagem pode apresentar algumas dificuldades. Além disto, o comportamento do fluxo de massa e da pressão, nos instantes iniciais, após a ruptura, tem uma forte característica 'stiff', tanto com relação ao tempo, como em relação à coordenada espacial.

Nas primeiras tentativas de executar esta modelagem, trabalhou-se com o sistema de equações formado pela Equação (3.6) a Equação (3.8), mais a equação de estado - Equação (3.13). Mesmo utilizando os critérios para convergência estipulados pelo esquema de Godunov, 1959, relacionados da Equação (3.31) à Equação (3.33), não foi possível manter um comportamento numérico estável da solução. A forte característica "stiff", associada a expressões com fortes não-linearidades, não possibilitou uma solução estável e viável computacionalmente. Isto só foi atingido quando da utilização do ajuste polinomial descrito, neste texto, nos seções 3.4 e 3.5. Este ajuste transformou o sistema em equações mais simples que, mesmo dentro desta forte

característica "stiff", viabilizaram a convergência da solução com um consumo de tempo computacional mais adequado.

Uma outra dificuldade encontrada foi o tratamento das condições de contorno, também evidenciada no trabalho de Seynhaeve et al, 1994. Além disto, cabe mencionar a dificuldade de validação, pois na literatura, há poucos dados experimentais e de inventário de descargas de fluidos em tubos longos, para efetuar uma comparação mais exata com valores previstos na modelagem. Esta dificuldade também foi sentida por outros autores (Mahgerefteh et al., 1999)

#### 4.2.2 Resultados obtidos para casos transientes

As simulações realizadas com a modelagem proposta neste texto, utilizaram fluidos típicos, encontrados na indústria de processamento de petróleo e petroquímico, como compostos pertencentes ao grupo de hidrocarbonetos leves puros, como o eteno e o propano ou na forma de misturas, como gás natural.

Os resultados foram obtidos através da solução numérica do sistema formado pela Equação (3.6), Equação (3.24) e pela equação de estado transformada em ajuste polinomial de ordem dois, mostrado na Equação (3.22), e estão mostrados na Figura 4.4, Figura 4.5, Figura 4.6 e Figura 4.7. Utilizou-se o esquema de Godunov, obedecendo os critérios de convergência e estabilidade mostrados na seção 3.6, contido neste texto.

A Figura 4.4 e a Figura 4.5 apresentam, respectivamente, o comportamento do fluxo de eteno  $G$  e da pressão  $P$  como função da distância  $L$  em vários instantes, até o limite de 1000 m. As condições iniciais de temperatura e pressão foram mantidas constantes sendo, respectivamente, de 298,15 K e 10,13 MPa. Com relação ao fluxo de massa  $G$ , sua condição inicial foi considerada  $G_0 = 0 \text{ kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$  (sistema considerado em repouso).

A discretização no regime transiente observou a condição Courant-Friedrichs-Lewy descrita na Seção 3. Nos primeiros instantes do processo de descarga para a atmosfera, a razão  $\Delta t/\Delta x$  apresentou um valor igual a  $2,7 \cdot 10^{-4} \text{ s/m}$  e foi sendo gradativamente aumentada até obter o valor de  $7,4 \cdot 10^{-4} \text{ s/m}$ , sendo que o avanço na coordenada espacial foi constante e igual a 1 m.

Conforme pode-se observar na Figura 4.4, a modelagem realizada permite descrever adequadamente a perda de contenção. Pode-se notar que no instante de 0,45 s, aproximadamente 80 % da tubulação ainda não havia sentido o efeito da perda de contenção. E, com cerca de 13,70 s, o sistema já desenvolve o escoamento em estado estacionário. Este tipo de informação é de muita importância para fins de análise de risco. Na Figura 4.5, os resultados obtidos mostram o perfil de pressão desenvolvido desde o instante inicial da descarga para a atmosfera até o regime em estado estacionário ser atingido. Na figura vê-se a queda de pressão avançando para o interior do duto a partir do ponto de ruptura.

Com relação ao esquema numérico utilizado, o método de Godunov, 1959, apresentou boa robustez com relação à estabilidade para distâncias de 500 a 1000 m, mas, para distâncias menores que esta, o esquema apresentou bastante instabilidade. Além disto, mesmo nas distâncias de 500 e 1000 m, a convergência não foi satisfatória. Ao visualizarmos a Figura 4.4, é possível notar que nos instantes de 1,4 a 2,4 s, os platôs formados não deveriam possuir valor inferior ao valor de fluxo de massa obtido em condição estacionária, que tem o valor de  $11570 \text{ kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ . Este fato pode estar ligado a fatores como o valores de avanço no tempo e no espaço ou até às condições de contorno utilizadas para esta distância. Em distâncias do ponto de ruptura total próximas da fonte de pressão não há fidelidade ao fenômeno de despressurização tão boa como ocorre em distâncias superiores à 1000 m. De qualquer maneira, para estas distâncias, é possível estimar o tempo que leva para o sistema entrar em estado estacionário, após haver a perda de contenção devido à ruptura total da tubulação.

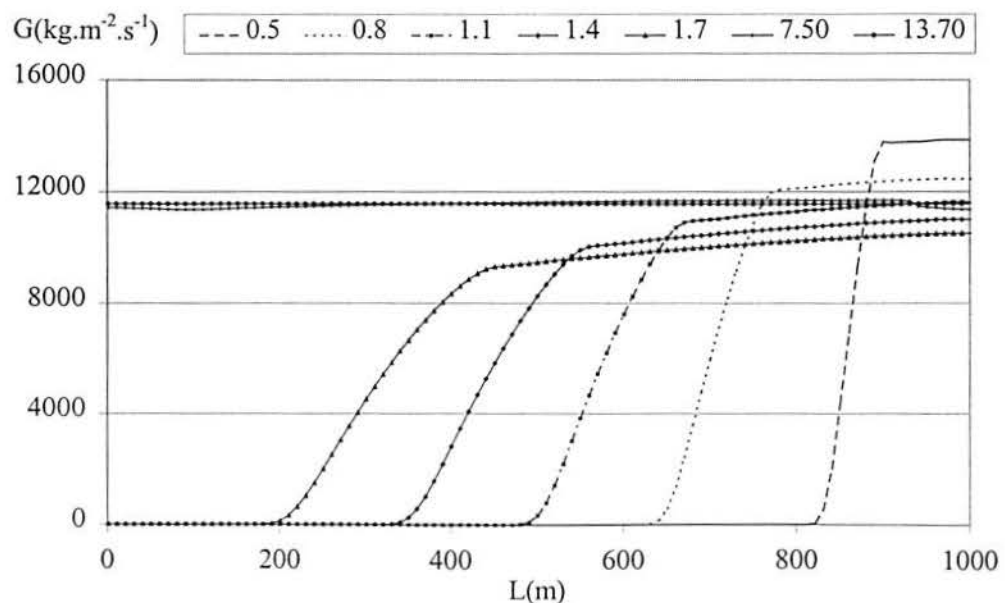


Figura 4.4 - Perfis de fluxo mássico de eteno em vários instantes para  $L = 1000$  m e  $D = 0,1$  m, após ruptura do duto (na legenda, instantes em segundos).



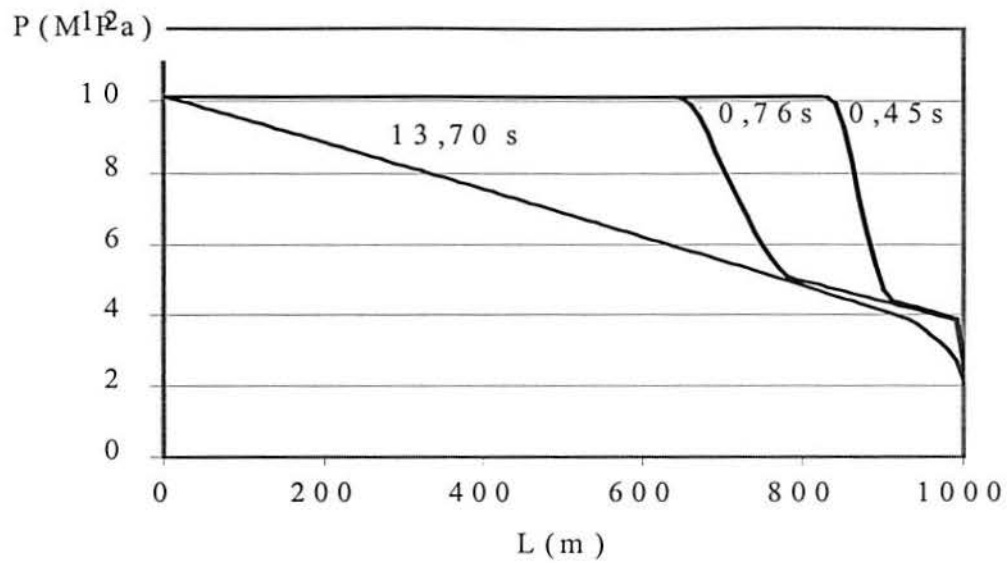


Figura 4.5 - Perfis de pressão de eteno em vários instantes para  $L = 1000$  m e  $D = 0,1$  m, após ruptura do duto (na legenda, instantes em segundos).

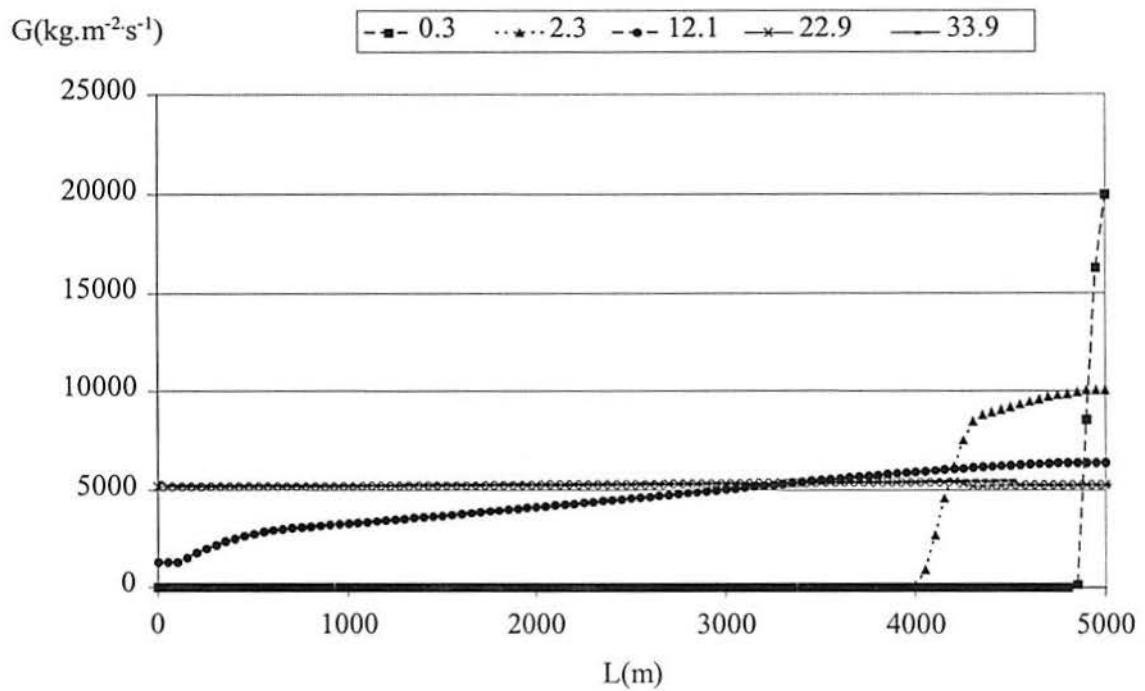


Figura 4.6 - Perfis de fluxo mássico de eteno em vários instantes para  $L = 5000$  m e  $D = 0,1$  m, após ruptura do duto (na legenda, instantes em segundos).

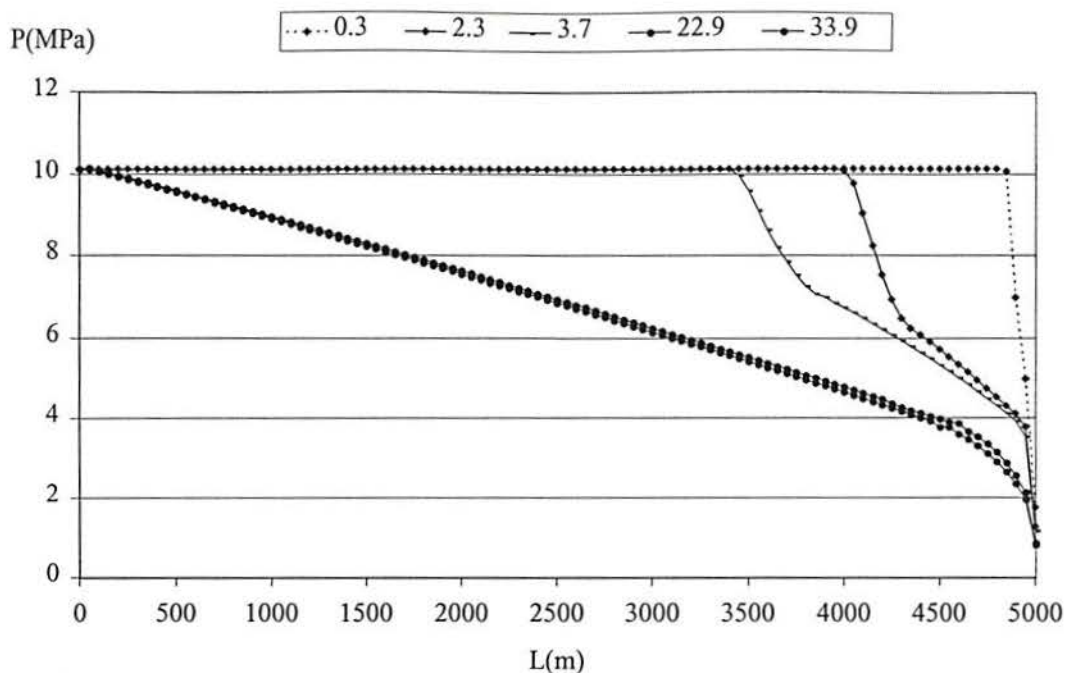


Figura 4.7 - Perfis de pressão de eteno em vários instantes para  $L = 5000$  m e  $D = 0,1$  m, após ruptura do duto (na legenda, instantes em segundos).

Do ponto de vista da descarga, para avaliação de risco de explosão, é importante notar que o escoamento crítico é alcançado ainda em pressão relativamente alta, cerca de 2 MPa, como mostra a Figura 4.5, e uma nova despressurização ocorrerá até que a pressão atinja o nível atmosférico, certamente, com formação de nuvens, ou seja, risco de incêndio e/ou, além de formação de poças de eteno. A despressurização do material escoando ao longo da tubulação leva a uma mudança de fase com o calor latente necessário sendo removido da própria massa do fluido, já que o eteno, nestas condições, apresenta uma fração de vapor de 38 % em volume e uma temperatura de 246 K, no ponto de ruptura. A despressurização subsequente já na atmosfera chega a 49,5 %, supondo que esta despressurização ocorra isoentropicamente.

Na distância de 5000 m, mostrada na Figura 4.6 e na Figura 4.7, no estado estacionário, o eteno é jogado na atmosfera a uma temperatura de 218 K e 890 kPa com uma fração molar de vapor igual a 45,9 %. Como a pressão do fluido ainda é maior que a da atmosfera (101,3 kPa), parte da fase líquida ainda sofrerá uma nova vaporização, chegando, a um total de 49,5 %. Este processo de vaporização dá-se com muito vigor, altas velocidades, provocando arraste da parte liqüefeita deixando o sistema. Portanto, a tendência é que mesmo a fração ainda na forma de líquido acabe rapidamente transformando-se em gás, quer seja por incorporação de calor do ar

por gotículas formadas por arraste na forma de aerossol, quer seja por ganho de calor de líquido na temperatura de ebulição que caia no solo.

Voltando ao aspecto da modelagem, na Figura 4.6, pode ver-se, que no instante inicial em que acontece a ruptura, praticamente em  $t = 0,3$  s, a despressurização ocorre em um espaço muito pequeno, provocando um gradiente de pressão muito elevado que reflete, diretamente, no fluxo de massa no mesmo instante. Esta despressurização inicial provoca a maior descarga de material, que vai sendo atenuada nos demais instantes. A informação desta perturbação de pressão, inicialmente, percorre cerca de 1000 m em 2,3 s. Neste instante, o eteno já escoar na forma bifásica.

Quando esta perturbação de pressão começa a se dirigir para montante do duto, esta velocidade vai se reduzindo, até chegar ao ponto onde o sistema entra em estado estacionário, atingindo o seu ponto crítico, ou seja, as condições de pressão à jusante podem ser reduzidas que o fluxo de massa se manterá constante. Neste ponto, que ocorre cerca de 34 s após haver a perda de contenção, o fluido se encontra em estado estacionário. Percebe-se que, comparando com os perfis obtidos na Figura 4.4, na distância de ruptura de 1000 m, as ondas de informação de perturbação de pressão, na Figura 4.6, não possuem nenhum platô muito inferior ao valor de fluxo mássico que se obtém no estado estacionário. A modelagem mostra um comportamento bem mais real e convergente.

A razão  $\Delta t/\Delta x$  utilizada começou com o valor de  $3,053 \cdot 10^{-4}$  s/m e, ao chegar no estado estacionário, assumiu o valor de  $6,3 \cdot 10^{-4}$  s/m., para satisfazer os critérios de convergência para o esquema de Godunov, 1959. O valor do avanço, na coordenada espacial, foi de 5 m.

A temperatura do processo de despressurização pode ser ajustada, assim como a pressão, através de um polinômio qualquer. A Figura 4.8 apresenta perfis de temperaturas em vários instantes, calculados para a distância de 5000 m.

Os perfis de temperatura tem comportamento semelhante ao da pressão, mostrados na Figura 4.7., onde lá estão representadas as curvas de temperatura como função da posição no duto em vários instantes.



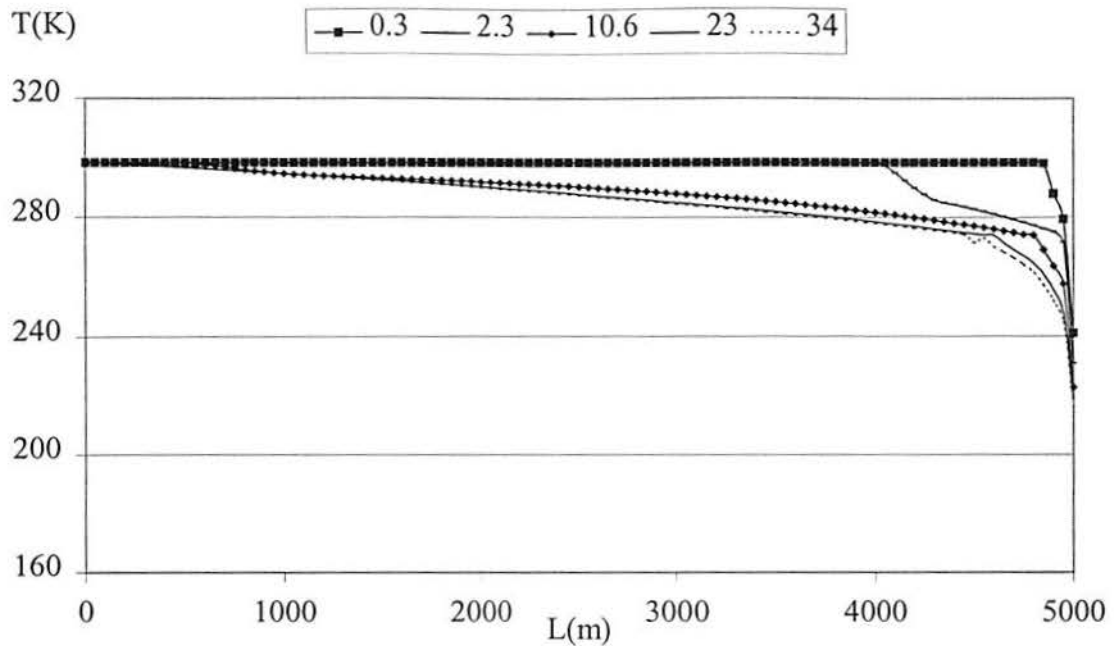


Figura 4.8 – Perfis de temperatura de eteno para vários instantes para a distância de 5000 m e diâmetro de 0,1 m (tempo em segundos na legenda).

Relativamente à determinação da condição inicial dos exemplos apresentados, ou seja, o levantamento dos valores de pressão, massa específica, temperatura e fluxo de massa crítico no ponto de ruptura em  $t = 0$ , foram utilizadas as equações descritas na seção 2.2.1 deste texto que representam o modelo de equilíbrio homogêneo, sendo este maximizado com relação à pressão.

Já com relação ao tratamento das condições de contorno, que seriam a função do fluxo de massa crítico no ponto de ruptura,  $G_C(t)$  e a função da massa específica nas mesmas condições,  $\rho(t)$ , não obteve-se a mesma “facilidade” encontrada na determinação da condição inicial. Utilizou-se a Equação 4.3 substituindo o valor da distância  $L$  pelo valor do incremento de posição  $\Delta x$  utilizado na discretização para o esquema de Godunov e procedeu-se à maximização com relação à pressão, em procedimento já mostrado em seção anterior neste texto, utilizando, como pressão inicial a pressão do fluido na linha um momento antes de haver a ruptura. Após, repete-se o procedimento para pressões mais baixas que a inicial até o limite alcançado no estado estacionário para a distância total,  $L$ .

No ponto da linha intacta ( $x = 0$ ), a pressão pode ser mantida constante para avaliar-se o tempo necessário para o sistema atingir o estado estacionário ou, em situações onde há esvazia-



mento de um trecho de linha, a pressão, em  $x = 0$ , assumirá valores cada vez menores até o ponto de chegar-se à pressão atmosférica absoluta.

### 4.3 Avaliação da hipótese isoentrópica

Um aspecto relevante é a escolha do caminho termodinâmico para realizar a despressurização do fluido. A descarga de um fluido, normalmente, é tratada como um processo isoentrópico. Os resultados mostrados até aqui admitiram esta hipótese. Mas como o processo de despressurização é bastante rápido, pode ser admitido um processo isoentálpico. Para avaliar-se o efeito do caminho termodinâmico no valor do fluxo de massa crítico alcançado no ponto de ruptura total de uma tubulação, estudou-se a descarga de eteno e os resultados estão apresentados na Figura 4.9.

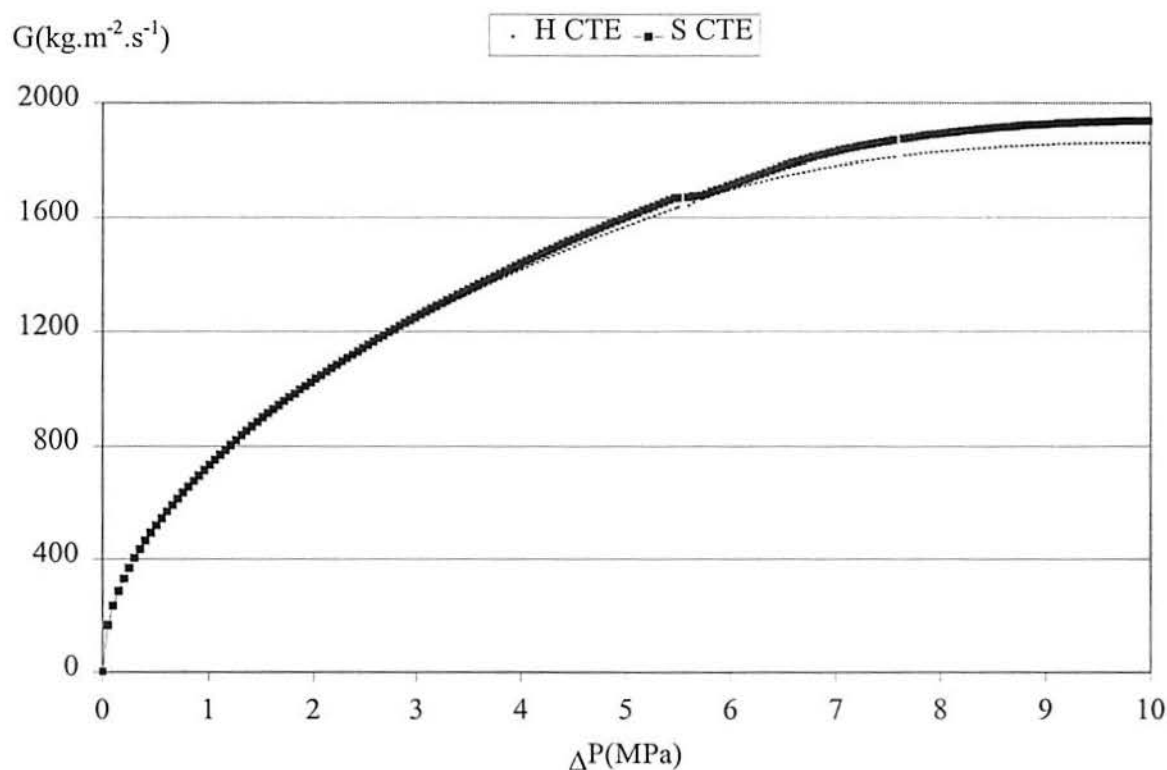


Figura 4.9 - Avaliação do caminho termodinâmico.

Na Figura 4.9, o fluxo de massa foi maximizado com relação à variação de pressão, observando o fluido e suas condições que consistiam de uma pressão inicial de 10 MPa e uma temperatura inicial de 298 K em um duto de 0,1 m de diâmetro e de 10000 m de comprimento. Nessas condições, o eteno existe como líquido subresfriado supercrítico. Ocorrendo a despressurização, há um resfriamento e, no ponto de ruptura, percebe-se que o processo isoentrópico fornece um valor de fluxo crítico igual a  $1937 \text{ kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ , que é um pouco maior que o calculado pelo processo isoentálpico, que vale  $1858 \text{ kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ . A pressão no ponto de ruptura, em ambos os casos, ficou em cerca de 303 kPa e a temperatura, no processo isoentrópico, foi um pouco mais baixa, assumindo um valor de 170 K e uma fração de vapor de 48 % e, no processo isoentálpico, de 175 K com uma fração molar de vapor de 72 % contra 6%. Isto se refletiu no valor do fluxo de massa, pois com maior fração de condensado, o fluxo de massa acaba sendo maior.

Este se fato se repete para outras substâncias e misturas. Utilizou-se os mesmos procedimentos, avaliou-se a influência do caminho termodinâmico para uma despressurização de gás natural, que inicialmente se encontrava a 11,7 MPa e 283 K, em uma tubulação de 0,419 m de diâmetro e 54000 m de comprimento. Chegou-se a um valor de fluxo de massa à entropia constante igual a  $1199 \text{ kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ , contra  $1160 \text{ kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ .

Quando a despressurização de um fluido ocorre à direita da região bifásica, ao verificar-se em um diagrama de Mollier entalpia-pressão, percebe-se que as linhas isoentrópicas formam quase que uma diagonal com as linhas isoentálpicas. Como a pressão final é a mesma para os dois caminhos termodinâmicos, o processo isoentrópico acaba gerando, em seu final, um maior avanço na região bifásica, condensando mais material a uma temperatura mais baixa. Se a despressurização ocorrer à esquerda da região bifásica, as linhas isoentrópicas apresentam quase que a mesma direção que as linhas isoentálpicas, fazendo com que não haja quase diferença entre um processo e outro.

Portanto, para fins práticos de estimativa de vazão, em caso de ruptura, na região de interesse deste estudo, o caminho termodinâmico tem pouca influência.

#### 4.4 Influência do isolamento térmico dos dutos

Quando ocorre uma perda de contenção em uma tubulação não-isolada, o problema a ser resolvido, do ponto de vista termodinâmico, é uma despressurização que não segue nenhum ca-

minho específico, ou seja, não é possível assumir que o processo de dê com entropia constante, entalpia constante, etc. O fluido, nestas circunstâncias, sofre uma transformação politrópica qualquer. Em função disto, a metodologia adotada até aqui, que utiliza um polinômio ajustado sobre pontos advindos da solução de um sistema formado pela equação de estado e pela equação da entropia ou pela equação da entalpia, não pode ser utilizada.

Assim sendo, o problema a ser resolvido, vai utilizar todas as equações de um sistema, formado pela Equação (3.6), pela Equação (3.7) e pela Equação (3.8) juntamente com a equação de estado, Equação (3.13). No estado estacionário, este sistema fica formado pelas seguintes equações, sem mudança da área de seção da tubulação e sem geração interna de energia.

$$G = \text{constante} \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{G^2}{\rho} + P \right] + \frac{f}{2D} \frac{G^2}{\rho} = 0 \quad (4.2)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{G}{\rho} (e + P) \right] + \frac{Q_c}{A_r} = 0 \quad (4.5)$$

Um sistema de quatro equações, sendo a Equação (4.1), a Equação (4.2), a Equação (4.5) e a equação de estado - Equação (3.13) - com quatro incógnitas, sendo elas  $G$ ,  $e$ ,  $P$  e  $\rho$ . O fluxo de massa  $G$  continua tendo que ser maximizado pela Equação (4.3) e Equação (4.5) pode ser rearranjada, sendo expressa através da entalpia e sendo aplicada em um duto com seção circular.

$$G \frac{\partial H}{\partial x} + \frac{G^3}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{\rho^2} \right) + 4 \frac{U}{D} (T_A - T) = 0 \quad (4.6)$$

Na equação (4.6),  $h$  é a entalpia, que é uma função da massa específica  $\rho$  e da temperatura  $T$ , e a terceira parcela (da esquerda para direita) é o aporte de energia térmica advinda do meio onde a tubulação está instalada, por convecção, cujo o termo  $U$  é o coeficiente global de troca térmica e  $T_A$  é a temperatura do meio.

A metodologia, que foi adotada para a obtenção do fluxo de massa crítico, utiliza um procedimento iterativo duplo. Discretiza-se a Equação (4.6). Admite-se, como valores de partida, o fluxo de massa crítico obtido em um processo isoentrópico e os perfis de massa específica como função da posição  $x$ . A Equação (4.6) discretizada, fica da seguinte forma.

$$G\Delta H + \frac{G^3}{2} \Delta \left( \frac{1}{\rho^2} \right) + 4 \frac{U}{D} (T_A - T) \Delta x = 0 \quad (4.7)$$

Procedendo desta forma, a Equação (4.7) fica com apenas uma incógnita, a temperatura  $T$ , que é resolvida para cada intervalo  $\Delta x$ . Com isto cria-se, juntamente, com o perfil de massa específica, o novo perfil de temperatura e os valores novos de pressão calculados pela equação de estado, um conjunto de pontos  $(\rho, T, P)$ , em cada valor de  $x$ . Com estes valores, a Equação (4.3) é maximizada novamente e um novo valor de fluxo de massa é obtido. Este novo valor de  $G$  é inserido novamente na Equação (4.7) e mantendo o perfil de temperatura calculado no passo anterior, calcula-se o novo perfil de massa específica para cada  $x$ . Novamente, tem-se um novo conjunto de pontos  $(\rho, T, P)$  que, com eles, pode ser calculado um novo fluxo de massa crítico. Assim,  $G$  é novamente inserido na Equação (4.7), um novo perfil de temperatura é determinado e, através deste procedimento, em um determinado momento, os valores de fluxo de massa do passo anterior e do passo atualizado serão iguais. Este procedimento mostrou-se adequado com convergência rápida (da ordem de  $10^{-5}$ ) e gerou os resultados com eteno e com gás natural, mostrados na Tabela 4.2 e Tabela 4.3.

Tabela 4.2 – Resultados com aporte de calor à tubulação na despressurização de eteno.

COMPOSTO:	ETENO
L (m) :	1000
D (m):	0,1
U (W.m <sup>-2</sup> ):	2
T <sub>A</sub> (K):	298
Po(MPa):	10,1
To(K):	298
G(kg.m <sup>-2</sup> .s <sup>-1</sup> ) (duto isolado)	G(kg.m <sup>-2</sup> .s <sup>-1</sup> ) (duto não-isolado)
11500	10600



Tabela 4.3 - Resultados com aporte de calor à tubulação na despressurização de gás natural.

COMPOSTO:	GÁS NATURAL
L (m) :	54000
D (m):	0,419
U ( $\text{W.m}^{-2}$ ):	5
$T_A(\text{K})$ :	283
$P_o(\text{MPa})$ :	11,7
$T_o(\text{K})$ :	283
<b>G(<math>\text{kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}</math>) (duto isolado)</b>	<b>G(<math>\text{kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}</math>) (duto não-isolado)</b>
1200	1150

A composição molar do gás natural utilizada neste texto é a mesma encontrada no trabalho de Mahghefeh et al., 1999. Seus componentes são o metano, com 73,6 %, etano com 13,4%, propano com 7,40 %, isobutano com 0,4 %, n-butano com 1 %, isopentano com 0,08 %, n-pentano com 0,07 %, n-hexano com 0,02 % e nitrogênio com 4,03 %.

Os resultados mostram que, para as condições de aporte de energia à tubulação estudadas, a influência do não-isolamento é pouco sentida no valor do fluxo de massa crítico no ponto de ruptura. Este é um resultado esperado, pois as condições de isolamento às quais os dutos são submetidos, quando enterrados entre uma unidade produtora e outra consumidora, ou, no caso de plataformas de petróleo em alto mar, quando os dutos estão submersos, possuem uma baixa troca térmica entre o fluido no duto e o meio onde ele está instalado. Além disto, Gebbeken e Eggers, 1997, estudando a descarga de tanques com fluidos armazenados em condições supercríticas, já haviam percebido que a descarga ocorre em condições quasi-isoentrópicas.

Com relação às condições de temperatura no ponto de ruptura, para o caso do eteno, o sistema isolado (adiabático) apresenta no ponto de ruptura uma temperatura de 246 K. Com o sistema isolado, a temperatura alcançou o valor de 257 K. Estes resultados estão coerentes, pois no sistema não-isolado deve aquecer o fluido e alcançar uma temperatura mais alta ao final da despressurização. No sistema isolado, pelo fluido estar mais protegido do meio, a despressuriza-

ção atinge um nível de temperatura mais baixo. Com gás natural, o sistema isolado apresentou uma temperatura de 110 K e o não-isolado, uma temperatura de 167 K.

#### 4.5 Validação do modelo

Na literatura, tem-se um número muito reduzido de trabalhos contendo dados experimentais ou inventários de acidentes que permitam a validação do modelo para comparação, fato este que também foi sentido por Mahgerefteh et al., 1999.

Para validar o modelo, utilizou-se os dados do inventário do acidente de “Piper Alpha”, também presente nos trabalhos de Richardson e Saville, 1991 e de Mahgerefteh et al., 1999. O caso em estudo trata-se da ruptura total de uma tubulação submarina que ligava duas plataformas de petróleo e que transportava gás natural no momento do acidente, cuja composição está descrita na seção 4.4. As condições em que se deu a descarga e as características da tubulação estão colocadas na Tabela 4.4.

A validação da modelagem será feita observando os dados do lado intacto da tubulação, ou seja, em  $x = 0$ . O inventário consiste nos valores de pressão medidos neste ponto durante a despressurização da tubulação.

Este, é um teste bastante completo para validar o modelo, pois se trata de uma descarga de uma mistura de hidrocarbonetos, escoando em condições supercríticas em uma tubulação sem isolamento. Além disso, o fator de atrito foi calculado quase que instantaneamente, utilizando o valor do fluxo de massa do instante anterior.

A condição inicial ( $t=0$ ) foi conhecida através de um modelo, também utilizado no trabalho de Mahgerefteh et al., 1999. Este procedimento objetivou manter os mesmos critérios para efeitos de comparação do modelo destes autores com o modelo desenvolvido neste texto. O levantamento do fluxo de massa em  $t = 0$  consiste no seguinte:

$$w = \int_P^{P_0} \frac{dP}{\rho \cdot a} \quad (4.13)$$

Tabela 4.4 – Dados das condições do escoamento no acidente de “Piper Alpha”

<b>L(KM)</b>	<b>54</b>
<b>D(m)</b>	<b>0,419</b>
<b>Pressão inicial (MPa)</b>	<b>11,7</b>
<b>Temperatura inicial (K)</b>	<b>283</b>
<b>Coef. Transf. Calor</b> <b>U (W.m<sup>-2</sup>.K<sup>-1</sup>)</b>	<b>5</b>
<b>Temperatura ambiente (K)</b>	<b>283</b>

A velocidade  $w$  é calculada, numericamente, utilizando a Equação (4.13), a partir do valor de pressão inicial que o gás natural possui no escoamento. A velocidade  $w$  em  $t = 0$  será aquela que atingir o valor da velocidade do som  $a$  no mesmo ponto de pressão, que, também é calculada pela Equação (2.9). Assim, conhecendo-se a velocidade crítica e o valor da massa específica que iguala a Equação (4.13), conhece-se, também, o valor do fluxo de massa crítico no instante inicial.

Na Figura 4.10 a linha tracejada corresponde aos resultados obtidos por Mahgerefteh et al., 1999, com o modelo denominado “CNGS-MOC”. A linha contínua é o modelo apresentado neste texto, que trabalha com o esquema de Godunov utilizando a equação de estado de Peng-Robinson modificada por Melhem, ajustada por um polinômio de ordem dois. Os pontos isolados são os valores de pressão, em Pa, medidos no lado intacto da tubulação ( $x=0$ )

Analisando-se ainda a Figura 4.10, verifica-se que o processo de esvaziamento levou cerca de 20000s. Há uma boa concordância entre os resultados obtidos pelo modelo. Para melhor avaliar-se a sua performance, determinou-se alguns testes estatísticos apresentados por Hanna et al., 1991, que estão listados na seção 3.9 deste texto e apresentados na Tabela 4.5 à Tabela 4.7, onde estão colocados os testes estatísticos para validação do modelo. Ainda que visualmente pareça haver boa concordância entre os resultados previstos pelo modelo com os valores de campo, a avaliação da concordância deve ser feita através de critérios mais concretos.



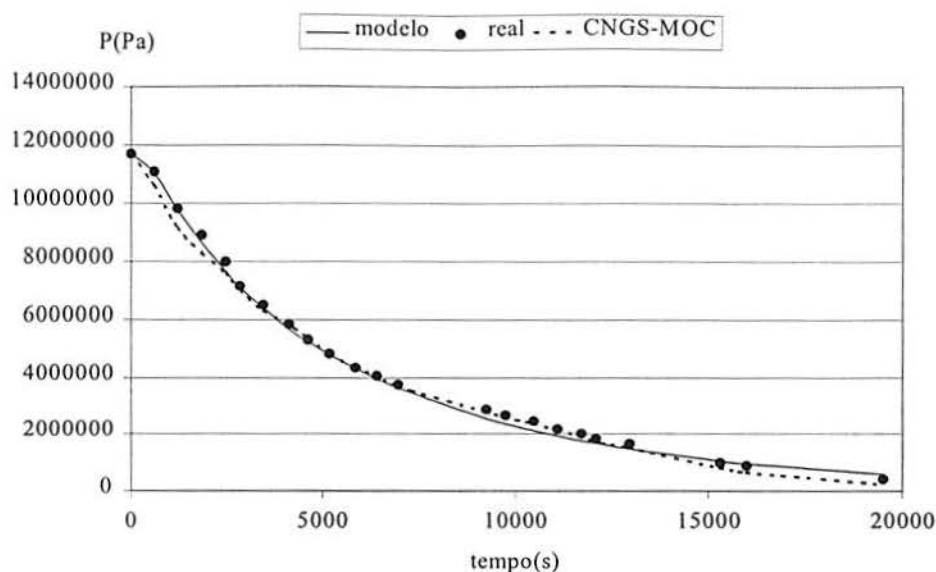


Figura 4.10 – Comparação dos modelo com o inventário do acidente de “Piper-Alpha”

Tabela 4.5 – Tabela para o cálculo do fator NMSE

t(s)	P(Pa)			$(P_m - P_o)^2 / (P_m \cdot P_o)$	
	modelo	real	CNGS-MOC	modelo	CNGS-MOC
0	11713100	11700000	11700000	0	0
617	11040579	11088000	10605000	1.83692E-05	0.001983948
1235	9782398	9825000	9140000	1.8883E-05	0.005225194
1852	8651987	8912000	8302000	0.000876796	0.005029233
2469	7674043	8000000	7605000	0.001730642	0.002564513
2840	7100141	7158000	7012000	6.58687E-05	0.00042469
3457	6423137	6526000	6328000	0.000252418	0.000949329
4136	5681201	5860000	5826000	0.000960267	3.38602E-05
4630	5260857	5333000	5406000	0.000185507	0.000184841
5185	4818509	4842000	4814000	2.36514E-05	3.36345E-05
5864	4324213	4351000	4360000	3.81379E-05	4.26982E-06
6419	3961621	4070000	4047000	0.000728495	3.21165E-05
6975	3632135	3754000	3684000	0.00108918	0.000354309
9259	2546585	2877000	2791000	0.014901243	0.00092108
9753	2361918	2667000	2581000	0.01477562	0.001074449
10494	2111861	2456000	2372000	0.022833517	0.001211199
11111	1925283	2175000	2128000	0.014891593	0.000477271
11728	1756285	2000000	1919000	0.016909905	0.001709484
12099	1662514	1825000	1709000	0.008701735	0.004314307
12963	1464206	1649000	1500000	0.014143339	0.008975541
15309	1045107	983000	802000	0.003754605	0.041555572
15987	950587	877000	645000	0.006495445	0.095151724
19506	594734	421000	227000	0.120549153	0.39381795



Na tabela 4.5, estão listados os valores, cuja a média, fornece o valor do fator NMSE calculada para o modelo desenvolvido neste texto e para o modelo desenvolvido por Mahgerefteh et al., 1999, o CNGS-MOC, para todos os valores de pressão levantados no inventário. O modelo deste texto apresentou um menor valor de  $(P_m - P_o)^2 / (P_m \cdot P_o)$ , igual a  $1,84 \cdot 10^{-5}$ , enquanto que o CNGS-MOC apresentou um valor mínimo de  $4,27 \cdot 10^{-6}$ . A comparação realizada entre os valores  $(P_m - P_o)^2 / (P_m \cdot P_o)$ , mostra que em boa parte deles o modelo deste texto apresenta-se com valores menores do que aqueles calculados para o modelo CNGS-MOC. Ao fazer-se uma média destes valores, ou seja, determinando-se o fator NMSE para os dois modelos, contata-se que o modelo deste texto apresenta um valor menor do que aquele calculado para o modelo CNGS-MOC (0,011 do primeiro contra 0,025 do segundo) sendo muito pequenos, o que é bom, pois, segundo Hanna et al., 1991, o fator NMSE deve ser o menor possível.

Na Tabela 4.6 estão apresentadas as razões de pressão previstas pelos modelos pela pressão observada para avaliação do fator FA2. Verifica-se, para os dois modelos, que o fator FA2 é 1, ou seja, todos as razões  $P_m/P_o$  ficaram entre 0,5 e 2.

Tabela 4.6 – Razão de pressão do modelo sobre a pressão observada para avaliar fator FA2

t(s)	P(Pa)			$P_m/P_o$	
	modelo	Real	CNGS-MOC	modelo	CNGS-MOC
0	11713100	11700000	11700000	1	1
617	11040579	11088000	10605000	0.99572324	0.95643939
1235	9782398	9825000	9140000	0.99566397	0.9302799
1852	8651987	8912000	8302000	0.97082442	0.93155296
2469	7674043	8000000	7605000	0.95925534	0.950625
2840	7100141	7158000	7012000	0.99191691	0.97960324
3457	6423137	6526000	6328000	0.98423803	0.96965982
4136	5681201	5860000	5826000	0.96948824	0.99419795
4630	5260857	5333000	5406000	0.98647233	1.01368836
5185	4818509	4842000	4814000	0.99514854	0.99421727
5864	4324213	4351000	4360000	0.99384345	1.00206849
6419	3961621	4070000	4047000	0.97337115	0.99434889
6975	3632135	3754000	3684000	0.96753737	0.98135322
9259	2546585	2877000	2791000	0.88515281	0.97010775
9753	2361918	2667000	2581000	0.8856085	0.96775403
10494	2111861	2456000	2372000	0.85987845	0.96579805
11111	1925283	2175000	2128000	0.88518774	0.9783908
11728	1756285	2000000	1919000	0.87814229	0.9595
12099	1662514	1825000	1709000	0.91096637	0.93643836
12963	1464206	1649000	1500000	0.88793583	0.90964221
15309	1045107	983000	802000	1.06318089	0.81586979
15987	950587	877000	645000	1.08390745	0.7354618
19506	594734	421000	227000	1.41266949	0.5391924

Tabela 4.7 – Fator FB em módulo

t(s)	P(Pa)			IF BI	
	modelo	real	CNGS-MOC	modelo	CNGS-MOC
0	11713100	11700000	11700000	0	0
617	11040579	11088000	10605000	0.004286	0.044530494
1235	9782398	9825000	9140000	0.004345	0.072238334
1852	8651987	8912000	8302000	0.029607	0.070872546
2469	7674043	8000000	7605000	0.041592	0.0506248
2840	7100141	7158000	7012000	0.008116	0.020606916
3457	6423137	6526000	6328000	0.015887	0.030807531
4136	5681201	5860000	5826000	0.030984	0.005818929
4630	5260857	5333000	5406000	0.01362	0.013595307
5185	4818509	4842000	4814000	0.004863	0.005799503
5864	4324213	4351000	4360000	0.006176	0.002066353
6419	3961621	4070000	4047000	0.026988	0.005667118
6975	3632135	3754000	3684000	0.032998	0.018822264
9259	2546585	2877000	2791000	0.121844	0.030345801
9753	2361918	2667000	2581000	0.121331	0.03277439
10494	2111861	2456000	2372000	0.150678	0.034797017
11111	1925283	2175000	2128000	0.121805	0.021845224
11728	1756285	2000000	1919000	0.129764	0.041337076
12099	1662514	1825000	1709000	0.093182	0.065647991
12963	1464206	1649000	1500000	0.118716	0.094633217
15309	1045107	983000	802000	0.061246	0.20280112
15987	950587	877000	645000	0.080529	0.304862024
19506	594734	421000	227000	0.342085	0.598765432

O que se verifica é que o modelo deste texto apresentou um mínimo para o valor do módulo do fator FB igual a 0,0043, enquanto que o modelo CNGS-MOC apresentou um valor mínimo de 0,0021. O valor ótimo para FB, segundo Hanna et al., 1991, é zero e os dois modelos possuem um FB bem próximo de zero. E, quando a análise é feita em torno da média, o modelo deste texto apresenta um FB em módulo de 0,071 enquanto que o modelo CNGS-MOC mostra um valor de FB em módulo igual a 0,080.

Em uma avaliação geral, o modelo desenvolvido neste texto, teve uma boa performance para todos os fatores estatísticos utilizados para validação de modelos. Inclusive em comparação com modelo apresentado na literatura (CNGS-MOC).

Mas, talvez a contribuição de maior significado que o modelo desenvolvido neste texto pode trazer é o seu baixo consumo de tempo computacional, se comparado com outros modelos. O modelo CNGS-MOC, desenvolvido por Mahgerefteh et al., 1999, que segundo os próprios



autores, constitui-se de uma ferramenta voltada para simulação rápida para descargas de dutos longos, gastou um tempo de CPU Pentium II de 300MHz de 6 dias para levantar o inventário apresentado na Figura 4.10. O modelo deste texto, que utiliza a equação de estado transformada em um ajuste polinomial, consome, tão somente, 12 h para realizar o mesmo inventário em equipamento Pentium I de 200MHz.

A Figura 4.11 mostra a simulação pelo modelo deste texto do termo fonte, que é a taxa de massa de gás natural que vai para o ambiente, no ponto de ruptura ( $x = L = 54\text{km}$ ), que foi levantado nos primeiros 450 s do acidente. O consumo de tempo computacional foi de 20 minutos, utilizando uma discretização da ordenada de posição,  $\Delta x$ , igual a 54 m em um equipamento Pentium I de 200MHz. O modelo CNGS-MOC, para determinar os mesmos valores nas mesmas condições, consumiu um tempo computacional de 3,75 h, quando utilizou uma discretização da ordenada de posição,  $\Delta x$ , igual a 500 m e 12,2 h quando o  $\Delta x$  foi de 250 m, em equipamento Pentium II de 300MHz.

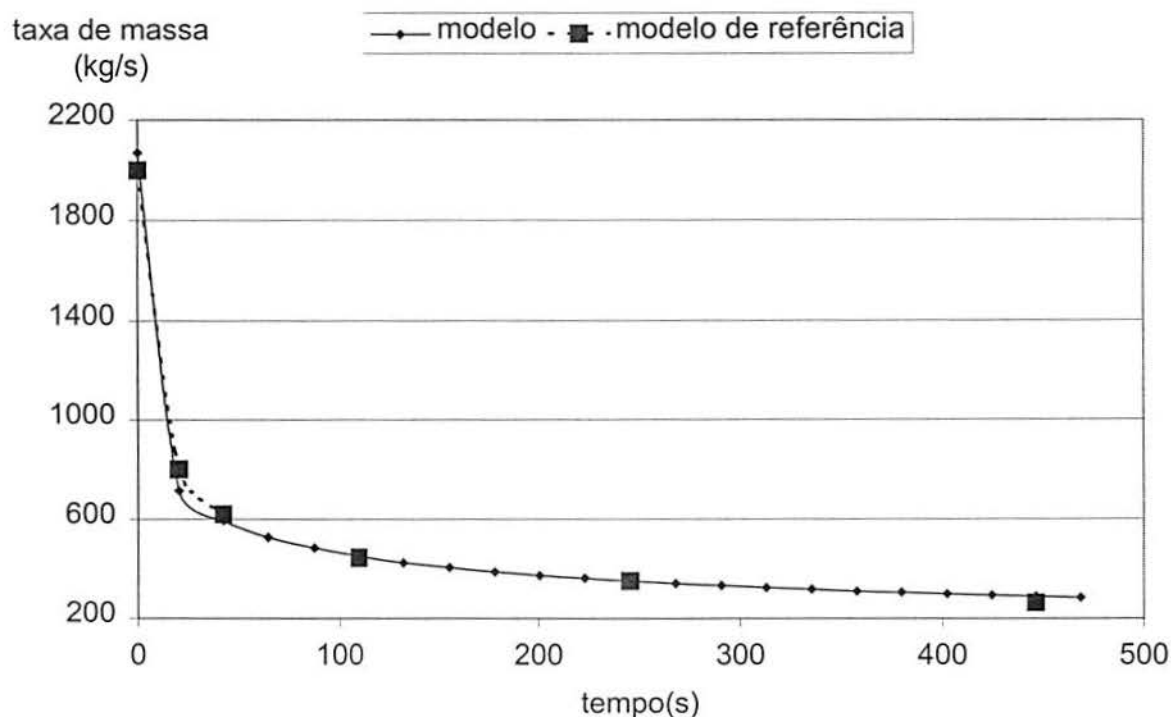


Figura 4.11 – Termo fonte calculado para o acidente de Piper Alpha

Finalizando, o modelo e os procedimentos desenvolvidos mostraram ser uma ferramenta bastante boa para avaliar a descarga de fluidos desenvolvendo escoamento bifásico em dutos longos, possuindo uma capacidade de prever resultados de campo análoga ao de outros modelos, com a vantagem de consumir um tempo computacional muito inferior, chegando a cerca de dez por cento do tempo consumido por estes outros modelos.



## 5 CONCLUSÃO

O procedimento numérico desenvolvido neste texto mostrou ser uma ferramenta ágil para simulação de inventários devido à descarga bifásica de fluidos escoando em condições supercríticas de dutos longos devido à perda de contenção. O esquema de Godunov é realmente um esquema que pode ser aplicado na solução de sistemas de equações diferenciais parciais hiperbólicas com forte componente “stiff”, correspondente aos balanços de massa, momento e energia utilizados na modelagem da descarga bifásica.

O modelo adotado, possui boa capacidade de prever os dados de campo com a grande vantagem de fazer-lo com muito baixo consumo de tempo computacional. Reduzindo-se o número de equações do sistema original, de quatro para duas, consegue-se estimar as grandezas envolvidas, mantendo-se um grau de sofisticação bastante elevado ao sistema de equações que descrevem o fenômeno com a utilização de uma equação de estado cúbica, como a equação de Peng-Robinson modificada por Melhem.

Com relação a resultados em regime estacionário, o fluxo de massa crítico de eteno a 10 MPa em uma ruptura total de um duto de 0,05 m de diâmetro os resultados obtidos foram os seguintes: para uma distância de 5000 m, apresentou um valor de  $1501 \text{ kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ ; para uma distância de 10000 m,  $1061 \text{ kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$  e para a distância de 15000 m,  $866 \text{ kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ . Variou-se, ainda, a pressão inicial para diâmetros de duto e comprimentos de distância do ponto de ruptura diferentes. Verificou-se, também, a influência da fixação ou não de um valor para o fator de atrito e concluiu-se que o valor calculado do fluxo de massa crítico pode ser afetado de forma significativa quando é utilizado um valor constante para este coeficiente.

Para inventários de hidrocarbonetos leves realizados em dutos curtos (da ordem de 1000 m), o modelo não apresentou a mesma capacidade de representar a situação física da depressurização, embora seja possível resolver o sistema de equações que descreve a perda de contenção. Com isto, resultados típicos de tempo de duração para atingir-se o regime estacionário em uma tubulação de 0,1 m de diâmetro, com escoamento de eteno que inicialmente se encontrava a 10,1 MPa, foi de 7,5 segundos, para uma distância de reservatório de 1000 m. Para uma distância maior, 5000 m, o tempo de estabilização chegou a quase 34 s. De qualquer forma, como a distância envolvida na grande maioria de tubovias instaladas para transporte de

hidrocarbonetos possuem distâncias bem superiores a 1000 m a ferramenta apresentada neste texto, mostrou-se mais vantajosa que os procedimentos utilizados para comparação, com o modelo de Mahgerefteh et al., 1999.

Em processos de esvaziamento de um trecho de linha, uma ruptura total de uma tubulação de 54 km e diâmetro de 0,419 m que mantinha gás natural escoando com uma pressão de 11,7 MPa, consumiu cerca de 20000 s (cerca de 5,6 h) para descarregar o conteúdo do trecho.

Em um outro aspecto, a possibilidade de se trabalhar em sistemas isolados termicamente, ou não, tem a mesma agilidade, muito embora nos casos de estudo avaliados, o fluxo de massa não sofreu uma grande influência dos efeitos de aporte de calor do ambiente para o duto. Para o eteno com pressão inicial de 10 MPa, escoando em um duto de 0,1 m de diâmetro e o acidente ocorrendo a uma distância de 1000 m da fonte, o fluxo de massa crítico no sistema com isolamento obteve um fluxo de massa de  $11500 \text{ kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$  contra  $10600 \text{ kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$  da mesma tubulação sem isolamento. Com relação à escolha do caminho termodinâmico, comparando resultados de descarga de eteno isoentropica com descarga isoentálpica, mostraram pouca diferença de valores. A descarga isoentrópica apresentou um valor de  $1937 \text{ kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$  contra  $1858 \text{ kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$  da descarga isoentálpica.

A validação do modelo utilizou dados de inventário de um acidente com gás natural, apresentando valores dos fatores estatísticos utilizados muito semelhantes aos de outros modelos, com uma redução bastante significativa de consumo de tempo computacional, já que o modelo adotado utiliza um esquema numérico explícito, que como já é sabido, são métodos mais rápidos que os esquemas numéricos implícitos. Para um inventário com 20000 segundos de duração, o modelo levou cerca de 12 h contra 6 dias da modelagem mais rápida desenvolvida por outros autores, que utilizaram um esquema numérico implícito.

Para dar seguimento a trabalhos nesta área, poder-se-ia realizar o tratamento numérico do sistema de equações envolvendo os balanços de massa, momento e energia, juntamente com o ajuste polinomial da equação de estado, utilizando o método das características, por exemplo. Além disto, poder-se-ia avaliar novas técnicas para obtenção das condições de contorno, necessárias para solução do sistema de equações que envolvem os balanços de massa, momento e de energia que descrevem o escoamento crítico bifásico.



## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Ames, W.F., 1992. **"Numerical Methods for Partial Differential Equations"**. 3rd ed. Academic Press. San Diego, California

Ardron, K.H., 1978. "A Two-Fluid Model for Critical Vapour-Liquid Flow", **International Journal of Multiphase Flow**, vol. 4, pp. 323-337.

Bouré, J.A., 1975. "On a Unified Presentation of the Non-Equilibrium Two-Phase Flow Models". **The Winter Annual Meeting of The American Society of Mechanical Engineers**, Houston, Texas, U.S.A., november, pp. 1-10.

Bouré, J.A., Fritte, A.A., Giot, M.M., Réocreux, M.L., 1976. "Highlights of Two-Phase Critical Flow; on the Links Between Maximum Flow Rates, Sonic Velocities, Propagation and Transfer Phenomena in Single and Two-Phase Flows", **International Journal of Multiphase Flow**, vol. 1, pp. 1-22.

Chen, P.C., Isbin, H.S., 1966. "Two-Phase Flow Through Apertures", **Energia Nucleare**, vol. 13, pp. 347-358.

Chun, M.H., Park, C.K., Park, J.W., 1996. "An Experimental Investigation of Critical Flow Rates of Subcooled Water through Short Pipes with Small Diameters". **Int.Comm. Heat Transfer.**, vol. 23, n° 8, pp 1053-1064.

D'Arcy, D.F., 1971. "On Acoustic Propagation and Critical Mass Flux in Two-Phase Flow", **Journal of Heat Transfer - Transactions of ASME**, november, 1971, pp. 413-421.

Dagan, R., Elias, E., Wacholder, E., Olek, S., 1993. "A two-Fluid Model for Critical Flashing Flows in Pipes", **International Journal of Multiphase Flow**, vol. 19, n°1, pp. 15-25.

Dickson, A.N., Markham, V.B., 1969. "Adiabatic Flashing Flow of Water in Tubes". **Fluid Mechanics and Measurements in Two-Phase Flow Systems - Proceedings**, september, 1969, pp.224-230.

Drai, P., Porterie, B., Monier, P., Lorand, J.C., 1998. "Numerical and Experimental Study of an Accidental Depressurization in an Enclosure Containing High-Pressure Liquid". **Nuclear Science and Engineering**. Vol. 129, pp 246-260.

Drew, D.A., 1992. "Analytical Modeling of Multiphase Flows". **Boiling Heat Transfer**, Lahey Jr., R.T., Editor, Elsevier, Amsterdam, p. 31.

Elias, E., Chambré, P.L., 1984. "A Mechanistic Nonequilibrium Model for Two-Phase Critical Flow", **International Journal of Multiphase Flow**, vol. 10, n<sup>o</sup>. 1, pp. 21-40.

Elias, E., Lellouche, G.S., 1994. "Two-Phase Critical Flow", **International J. Multiphase Flow**, vol.20, p.91.

Fairuzov, Y.V., 1998. "Numerical Solution for Blowdown of Pipeline Containing Flashing Liquid", **AIChE Journal**, vol. 44, n<sup>o</sup> 9, pp. 2124-2128.

Favrat, D., Denisart, J.P., 1984. "Vaporization of Superheated Water Under Sudden Depressurization", **Multi-Phase Flow and Heat Transfer III. Part A: Fundamentals**, Veziroglu, T.N. e Bergles, A.E. Editors, Elsevier, Amsterdam, p.513.

Gebbeken, B., Eggers, R., 1996. "Blowdown of Carbon Dioxide from Initially Supercritical Conditions", **Journal Loss Prevention Process Industries**, pp. 285-293.

Ghiaasiaan, S.M., Geng, H., 1998. "Mechanistic Modeling of Critical Flow of Initially Subcooled Liquid Containing Dissolved Noncondensables Through Cracks and Slits based on the Homogeneous Equilibrium Mixture Method". **Nuclear Science and Engineering**. Vol. 129, pp 294-304.

Ghiaasiaan, S.M., Geng, H., 1997. "Mechanistic Nonequilibrium Modeling of Critical Flashing Flow of Subcooled Liquids Containing Dissolved Noncondensables". **Numerical Heat Transfer, Part A**. Vol. 32, pp 435-457.



Giot, M., 1994. "Two-Phase Releases", **Journal Loss Prevention Process Industries**, vol.7, n<sup>o</sup> 2, pp. 77-93.

Giot, M., Fritte, A., 1983. "Modeling of Critical Flow", **Advances in Two-Phase Flow and Heat Transfer - Fundamentals and Applications**, vol. 1, pp. 61-77.

Godunov, S.K., 1959, "A finite difference method for the numerical computation and discontinuous solutions of the equations of fluid dynamics", **Mat. Sb.**, vol.47, p.271.

Grolmes, M.A., 1984, "A Simple Approach to Transient Two-Phase Level Swell", **Multi-Phase Flow and Heat Transfer III. Part A: Fundamentals.**, Veziroglu, T.N. e Bergles, A.E. Editors, Elsevier, Amsterdam, p.513.

Grolmes, M.A., Fauske, H.K., 1984, "An Evaluation of Incomplete Vapor Phase Separation in Freon-12 Top Vented Depressurization Experiments", **Multi-Phase Flow and Heat Transfer III. Part A: Fundamentals.**, Veziroglu, T.N. e Bergles, A.E. Editors, Elsevier, Amsterdam, p.539.

Grolmes, M.A., Leung, J.C., 1984, "Scaling Considerations for Two-Phase Critical Flow", **Multi-Phase Flow and Heat Transfer III. Part A: Fundamentals.**, Veziroglu, T.N. e Bergles, A.E. Editors, Elsevier, Amsterdam, p.549.

Grolmes, M.A., Leung, J.C., Fauske, H.K., 1984, "Transient Two-Phase Flow Discharge of Flashing Liquids Following a Break in a Long Transmission Pipe Line", **Multi-Phase Flow and Heat Transfer III. Part A: Fundamentals.**, Veziroglu, T.N. e Bergles, A.E. Editors, Elsevier, Amsterdam, p.567.

Hager, W.H., Fellow, A.S.C.E., Giudice, G., 1998. "Generalized Culvert Design Diagram", **Journal of Irrigation and Drainage Engineering**, Sep-Oct.

Hanna, S.R., Strimatis, D.G. e Chang, J.C., 1991. "Uncertainties in Hazardous gas Model Predictions", **Proceedings of the International Conference and Workshop on Modeling and Mitigating the Consequences of Accidental releases of Hazardous Materials**, New Orleans, USA, May, pp. 345-368.

Henry, R.E., 1970. "The Two-Phase Critical Discharge of Initially Saturated or Subcooled Liquid ", **Nuclear Science and Engineering**, vol. 41, pp. 336-342.

Henry, R.E., Fauske, H.K., 1971. "The Two-Phase Critical Flow of One-Component Mixtures in Nozzles, Orifices, and Short Tubes", **Journal of Heat Transfer - Transactions of ASME**, may, 1971, pp.179-187.

Henry, R.E., Fauske, H.K., McComas, S.T., 1970. "Two-Phase Critical Flow at Low Qualities. Part I: Experimental", **Nuclear Science and Engineering**, vol. 41, pp.79-91.

Henry, R.E., Fauske, H.K., McComas, S.T., 1970. "Two-Phase Critical Flow at Low Qualities. Part II: Analysis", **Nuclear Science and Engineering**, vol. 41, pp. 92-98.

Jones, O.C., 1992. "Elements, of Two-Phase Flow", **Boiling Heat Transfer**, Lahey Jr., R.T., Editor, Elsevier, Amsterdam, pp. 1-30.

Jones, O.C., 1992. "CRITICAL FLOW: Basic Considerations and Limitations in the Homogeneous Equilibrium Model", **Boiling Heat Transfer**, Lahey Jr., R.T., Editor, Elsevier, Amsterdam, pp. 175-187.

Jones, O.C., 1992. "NONEQUILIBRIUM PHASE CHANGE-1. Flashing Inception, Critical Flow, and Void Development in Ducts", **Boiling Heat Transfer**, Lahey Jr., R.T., Editor, Elsevier, Amsterdam, pp. 189-234.

Khajehnajafi, S. e Shinde, A., 1994, "Prediction of discharge rate from pressurized vessel blowdown through sheared pipe", **Process Safety Progress**, vol 13 n.2, p. 75.

Kim, Y. e O'Neal, D.L., 1994. "The Effects of Oil on the Two-Phase Critical Flow of Refrigerant 134a through Short Tube Orifices". **Int. J. Heat Mass Transfer.**, vol. 37, n° 9, pp. 1377-1385.

Kim, Y. e O'Neal, D.L., 1995. "A Comparison of Critical Flow Models for Estimating Two-Phase Flow of HCFC22 and HFC134a through Short Tube Orifices". **Int. J. Refrig.**, vol. 18, n° 7, pp. 447-455.

Kyle, B.G., 1992, "**Chemical and Process Thermodynamics**", 2nd ed. Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey.

Lee, J.H., Koshizuka, S., Oka, Y., 1998. "Development of a LOCA Analysis Code for the Supercritical-Pressure Light Water Cooled Reactors". **Ann. Nucl. Energy**, vol. 25, n° 16, pp. 1341-1361.

Leung, J.C., Nazario, F.N., 1990. "Two-Phase Flashing Flow Methods and Comparisons", **Journal of Loss Prevention Process Industries**, vol.3, pp. 253-260.

Mahgerefteh, H., Saha, P. e Economou, I.G., 1999. "Fast Numerical Simulation for Full Bore Rupture of Pressurized Pipelines", **AIChE Journal**, vol. 45, n° 6, pp. 1191-1201.

Malnes, D., 1975. "Critical Two-Phase Flow Based on Non-Equilibrium Effects", **The Winter Annual Meeting of The American Society of Mechanical Engineers**, Houston, Texas, U.S.A., november, pp.11-18.

Melhem, G.A., Little, A.D., Goodwin, B.M. e Saini, R., 1989, "A Modified Peng-Robinson Equation State", **Fluid Phase Equilibria**, vol.47, p189.

Michaelides, E.E., 1983. "A Novel Approach for the Determination of Critical Two-Phase Flow", **Advances in Two-Phase Flow and Heat Transfer - Fundamentals and Applications**, vol. 2, pp. 465-481.

Minato, A., Takamori, K. Susuki, A., 1995. "Numerical Study of Two-Dimensional Structure in Critical Steam-Water Two-Phase Flow". **Journal of Nuclear Science and Technology**, vol.32, n° 5, pp. 464-475.

Moody, F.J., 1965. "Maximum Flow Rate of a Single Component Two-Phase Mixtures", **Journal Heat Transfer-ASME Trans.**, série C, vol. 87, pp. 134-142.

Moody, F.J., 1966. "Maximum Two-Phase Vessel Blowdown from Pipes", **Journal Heat Transfer-ASME Trans.**, série C, vol. 88, p. 285



Moody, F.J., 1975. "Maximum Discharge Rate of Kiquid-Vapor Mixtures from Vessels", **The Winter Annual Meeting of The American Society of Mechanical Engineers**, Houston, Texas, U.S.A., november, pp. 27-36.

Nielsen, D.S., 1991. "Validation of Two-Phase Outflow Model", **Journal Loss Prev. Process Indl**, vol. 4, pp. 236-241, july.

Nikitopoulos, D.E., 1993. "Mach Number Scaling of Single-Component, Two-Phase Flow". **Journal of Fluids Engineering, Transactions of the ASME**, vol. 115, december.

Obermeier, E., 1990. "Two-Phase Critical Flow-Rates of Refrigerants: Thermodynamic Limits of Flow-Rates in Tubes and Orifices", **Rev. Int. Froid**, vol. 13, pp. 301-308.

Ochi, J., Ayukama, K., Kawahara, G., 1996. "Application of Three-Layer Model Analysis to Single-Component Two-Phase Critical Flow through a Converging Nozzle (Comparison of the Expermental Results for Steam-Water Mixture and Carbon Dioxide with the Calculated Results)". **JSME International Journal, Série B**. vol. 39, n° 1, pp 80-85.

Perry, R.H. e Chilton, C.H., 1980, "**Manual de Engenharia Química**", 5ª ed. Ed.Guanabara Dois, Rio de Janeiro.

Pilz, V e van Herck, W., 1976, "Chemical Engineering Investigations with Respect to the Safety of Large Chemical Plants", **Third Symposium on Large Chemical Plants. European Federation of Chemical Engineering**, Antwerp.

Reid, R.C., Prausnitz, J.M., Poling, B.E. 1987, "**The Properties of Gases and Liquids**", 4th ed., McGraw-Hill, Boston.

Richardson, S.M. e Saville, G., 1991, "Blowdown of Pipelines", **Society of Petroleum Engineers Offshore Europe 91**, Aberdeen, U.K., paper SPE 23070, pp. 369-377.

Schrock, V.E., Amos, C.N., 1984. "Two-Phase Critical Flow", **China - U.S. Seminar on Two-Phase Flows and Heat Transfer**, Sian, China, pp. 115-138.



Seynhaeve, J.M.; Lombré, R.; Ducrocq, J., Bolle, L., 1994, "Physical Modelling of Rapid Transients in Long Pipes, in Case of Vaporization: an Efficient Tool for Safety Management", **Process Safety Progress**, vol 13, n. 2, p. 95.

Simoneau, R.J., 1975. "Pressure Distribution in a Converging-Diverging Nozzle During Two-Phase Choked Flow of Subcooled Nitrogen", **The Winter Annual Meeting of The American Society of Mechanical Engineers**, Houston, Texas, U.S.A., november, pp. 37-46.

Sozzi, G.L., Sutherland, W.A., 1975. "Critical Flow of Saturated and Subcooled water at High Pressure", **The Winter Annual Meeting of The American Society of Mechanical Engineers**, Houston, Texas, U.S.A., november, pp. 19-28.

Trapp, J.A., Ransom, V.H., 1982. "A Choked-Flow Calculation Criterion for Nonhomogeneous, Nonequilibrium, Two-Phase Flows", **Int. Journal of Multiphase Flow**, vol. 8, n<sup>o</sup>. 6, pp. 669-681.

"Yellow Book", 1997. Committee for Prevention of Disasters. "**Methods for the Calculation of Physical Effects – Part 1** ", 3<sup>rd</sup> Edition, Sdu Uitgevers.

Wallis, G.B., 1980. "Critical Two-Phase Flow", **Int. Journal Multiphase Flow**, vol. 6, pp. 97-112.

## APÊNDICE 1

Na seqüência, serão apresentadas as seqüências de operações e comandos utilizados no MATHEMATICA 2.0<sup>TM</sup> para a despressurização isentrópica do etileno.

```

z0=0.354552;
p0=100;
t0=298.15;
tc=282.4;
pc=49.74;
m=0.4873;
n=0.457;
pr0=p0/pc;
tr0=t0/tc;
alfa0=Exp[m*(1-tr0)+n*(1-Sqrt[tr0])^2];
a0=0.45724*pr0*alfa0/tr0/tr0;
b0=0.0778*pr0/tr0;
cte1=1+Sqrt[2];
cte2=1-Sqrt[2];
a1=0.909;
a2=3.74/100;
a3=-1.994/100000;
a4=4.192/1000000000;
rc=1.986;
alfa=Exp[m*(1-(T/tc))+n*(1-Sqrt[(T/tc)])^2];
a=0.45724*(P/pc)*alfa/(T/tc)/(T/tc);
b=0.0778*(P/pc)/(T/tc);
s0=2.078*(n/Sqrt[tr0]+m-n)*alfa0*Log[((z0+cte1*b0)/(z0+cte2*b0))]-Log[z0-b0];
int=a1*Log[(T/tc)/tr0]/rc+a2*tc*((T/tc)-tr0)/rc+a3*tc*tc*((T/tc)^2-
tr0^2)/rc+a4*tc*tc*tc*((T/tc)^3-tr0^3)/rc;
s=2.078*(n/Sqrt[T/tc]+m-n)*alfa*Log[((z+cte1*b)/(z+cte2*b))]-Log[z-b];
fz=z^3+(b-1)*z^2+(a-3*b^2-2*b)*z+(b^3+b^2-a*b);
gs=s0-s+int-Log[P/p0];

```

```
Do[{z0,t0,p0}={z,T,P}/.FindRoot[{fz==0,gs==0},{z,z0},{T,t0}];Print[z0,"  
",p0},{P,100,30,-0.1}]
```

```
",t0,"
```

## APÊNDICE 2

Programa para execução do esquema de Godunov na solução do problema transiente para modelagem do escoamento do etileno supercrítico em um duto de 1000 m de comprimento.

implicit none

```

real Mmais05,Mmeno05,Gmais05,Gmeno05
real M,G,P,dx,dt,f,dia,T,A,front1,front2
integer n,j
dimension M(20001,1001),G(20001,1001)
open(6,file='c:\eteno\teta1050.dat',status='old',access='sequential')
    f=0.003
    dia=0.1
    Do j = 1,1000
        M(1,j)=322.8232
        G(1,j)=0
    enddo
    M(1,1001)=300.504
    G(1,1001)=111620
    dx=1
    Do n = 2,20000
        M(n,1)=322.8232
    enddo
    Do n = 1,20000
        Do j = 2,1000
            dt = dx/(10*(G(n,1001)/M(n,1001)))
            Mmais05=0.5*(M(n,j+1)+M(n,j))-(dt/dx)*(G(n,j+1)-G(n,j))
            Mmeno05=0.5*(M(n,j)+M(n,j-1))-(dt/dx)*(G(n,j)-G(n,j-1))
            Gmais05=0.5*(G(n,j+1)+G(n,j))-(dt/dx)*(G(n,j+1)**2/M(n,j+1)-
G(n,j)**2/M(n,j)+P(M(n,j+1))-P(M(n,j)))-dt*f*(G(n,j+1)**2/M(n,j+1)+G(n,j)**2/M(n,j))/4/dia
            Gmeno05=0.5*(G(n,j)+G(n,j-1))-(dt/dx)*(G(n,j)**2/M(n,j)-G(n,j-1)**2/M(n,j-1)+P(M(n,j))-
P(M(n,j-1)))-dt*f*(G(n,j)**2/M(n,j)+G(n,j-1)**2/M(n,j-1))/4/dia
            M(n+1,j)=M(n,j)-(dt/dx)*(Gmais05-Gmeno05)

```



```

G(n+1,j)=G(n,j)-(dt/dx)*(Gmais05**2/Mmais05-Gmeno05**2/Mmeno05+P(Mmais05)-
P(Mmeno05))-dt*f*(G(n,j)**2)/2/dia/M(n,j)
G(n+1,1)=G(n+1,2)
M(n+1,1001)=front1(M(n+1,1000))
G(n+1,1001)=front2(M(n+1,1000))
if(j.eq.1000)then
write(*,*)M(n,j),G(n,j),n
endif
enddo
enddo
Do n = 1,20001,500
Do j = 1,1001,10
write(6,5)
n,j,M(n,j),G(n,j),P(M(n,j))/101325,T(M(n,j)),A(M(n,j)),n*dx/(10*(G(n,1001)/M(n,1001)))
5 format (i5,' ',i4,' ',f10.4,' ',f12.4,' ',f10.4,' ',f10.4,' ',f8.4,' ',f9.6)
enddo
enddo
stop
end
real function P(M)
real M
if(M.GE.277.266692) then
P = 7.62341686585743000E+02*M**2 - 3.20203511542429000E+05*M +
3.40458037778725000E+07
else
P = -3.99782241208077000E+01*M**2 + 2.40134792861002000E+04*M +
2.61384741288315000E+05
endif
end function
real function T(M)
real M
T = -3.94803657810788E-11*M**6 + 5.23724864292565E-08*M**5 -
2.83402475797618E-05*M**4 + 8.01636118980632E-03*M**3 -
1.25210409336063E+00*M**2 + 1.02710341964036E+02*M - 3.20754736462583E+03

```

```

end function
real function A(M)
real M
    A = -1.8125225142785E-13*M**6 + 2.3934568335098E-10*M**5 -
1.2883018809973E-07*M**4 + 3.6225547416989E-05*M**3 - 5.6223704468384E-03*M**2 +
4.5558069207162E-01*M - 1.4704651953200E+01
end function
real function front1(M)
real M
if(M.GE.70)then
    front1 = -1.0284753958667E-05*M**3 + 6.9214343158430E-03*M**2 -
4.8224416069718E-01*M + 8.0590240070263E+01
else
    front1 = 85.78
endif
end function
real function front2(M)
real M
if(M.GE.70)then
    front2 = 1.5566782432099E-03*M**3 + 1.1650277364328E+00*M**2 -
2.7028136137644E+02*M + 2.5344683024692E+04
else
    front2 = 11568
endif
end function

```

## APÊNDICE 3

A seguir é apresentado a seqüência de operações criadas no MAPLE V R5 <sup>TM</sup> para depressurização do eteno à entalpia constante na região monofásica e na região bifásica.

```
monofet := proc(a, b, c)
local P, S1, S2, Z, R1, R2, T, V, g, f, sol, Po, To, Vo, V1,
T1, A, B, C, D, E, C1, D1, DISC;
  Po := a;
  To := b;
  Vo := c;
  for P from Po by -.5 to 45 do
    f := -P + .08205*T/(V - .036242412) - 4.935429933*(
      .416566789952647*10^(-5)*T^2
      - .00403368137567593*T + 1.80680321778686)/(
      V^2 + .072484824*V - .001313512428) = 0;
    g := (.000133947310606813*To^2 - .153834893849022*To
      + 104.365893138316)*evalf(ln((
      Vo + .036242412 + .036242412*evalf(sqrt(2)))/(
      Vo + .036242412 - .036242412*evalf(sqrt(2))))) -
      (.000133947310606813*T^2 - .153834893849022*T
      + 104.365893138316)*evalf(ln((
      V + .036242412 + .036242412*evalf(sqrt(2)))/(
      V + .036242412 - .036242412*evalf(sqrt(2)))))
      + P*V - Po*Vo - .04449539275*T + .04449539275*To
      + .0007725755288*T^2 - .0007725755288*To^2
      - .2746017120*10^(-6)*T^3
      + .2746017120*10^(-6)*To^3
      + .4329728097*10^(-10)*T^4
      - .4329728097*10^(-10)*To^4 = 0;
    sol := fsolve({g, f}, {T, V},
      {T = 250 .. 300, V = 0 .. .5});
    V1 := min(rhs(sol[1]), rhs(sol[2]));
```

```

T1 := max(rhs(sol[1]), rhs(sol[2]));
Z := 12.18769043*P*V1/T1;
A := 733.1077657*P*(.416566789952647*10^(-5)*T1^2
    - .00403368137567593*T1 + 1.80680321778686)/T1^2
    ;
B := .4417112980*P/T1;
C := B - 1;
D := A - 3*B^2 - 2*B;
E := B^3 + B^2 - A*B;
C1 := C + Z;
D1 := D + C1*Z;
DISC := C1^2 - 4*D1;
lprint(28*1/V1, 101325*P, T1, DISC)
od
end

etenobifh := proc (a, b) local f, Po, T, P, sol, V1, V2, V3, VL, VG, ZL, ZG, HL, HG, X, Vo, To;
Vo := .867415804128e-1; To := 298.15; Po := a; T := b; for P from Po by -.5 to 1 do f := -
P+.8205e-1*T/(V-.36242412e-1)-4.935429933*(.416566789952647e-5*T^2-
.403368137567593e-2*T+1.80680321778686)/(V^2+.72484824e-1*V-.1313512428e-2) = 0; sol
:= solve(f,V); V1 := sol[1]; V2 := sol[2]; V3 := sol[3]; VG := max(V1,V2,V3); VL :=
min(V1,V2,V3); ZL := 12.18769043*P*VL/T; ZG := 12.18769043*P*VG/T; HG :=
(.133947310606813e-3*To^2-
.153834893849022*To+104.365893138316)*evalf(ln((Vo+.36242412e-1+.36242412e-
1*evalf(sqrt(2)))/(Vo+.36242412e-1-.36242412e-1*evalf(sqrt(2)))))-(.133947310606813e-
3*T^2-.153834893849022*T+104.365893138316)*evalf(ln((VG+.36242412e-1+.36242412e-
1*evalf(sqrt(2)))/(VG+.36242412e-1-.36242412e-1*evalf(sqrt(2))))) +P*VG-Po*Vo-
.4449539275e-1*T+.4449539275e-1*To+.7725755288e-3*T^2-.7725755288e-3*To^2-
.2746017120e-6*T^3+.2746017120e-6*To^3+.4329728097e-10*T^4-.4329728097e-10*To^4;
HL
:=
(.133947310606813e-3*To^2-
.153834893849022*To+104.365893138316)*evalf(ln((Vo+.36242412e-1+.36242412e-
1*evalf(sqrt(2)))/(Vo+.36242412e-1-.36242412e-1*evalf(sqrt(2)))))-(.133947310606813e-
3*T^2-.153834893849022*T+104.365893138316)*evalf(ln((VL+.36242412e-1+.36242412e-
1*evalf(sqrt(2)))/(VL+.36242412e-1-.36242412e-1*evalf(sqrt(2))))) +P*VL-Po*Vo-

```



```
.4449539275e-1*T+.4449539275e-1*To+.7725755288e-3*T^2-.7725755288e-3*To^2-
.2746017120e-6*T^3+.2746017120e-6*To^3+.4329728097e-10*T^4-.4329728097e-10*To^4;
T := T*(1-.5*(VG-VL)/(HG-HL)); X := -HL/(HG-HL); lprint(28*1/(VL+X*(VG-
VL)),101325*P,X,T) od end
```

## APÊNDICE 4

Programa desenvolvido em FORTRAN para simulação do inventário do acidente de “Piper-Alpha”, utilizado para validação utilizando como composto o gás natural..

```
implicit none
```

```
real Mmais05,Mmeno05,Gmais05,Gmeno05,tempo
```

```
real M,G,dx,dt,f,dia
```

```
real P,cf
```

```
integer n,j,h
```

```
dimension M(40001,1001),G(40001,1001)
```

```
open(6,file='c:\Msdev\teta2030.dat',status='new',access='sequential')
```

```
dia=0.419
```

```
dx=54
```

```
cf=0.03
```

```
tempo=0
```

```
Do j = 1,1000
```

```
M(1,j)=173.3191
```

```
G(1,j)=0
```

```
enddo
```

```
M(1,1001)=99.7400
```

```
G(1,1001)=25493.0000
```

```
write(6,*) tempo, P(M(1,1))
```

```
write(*,*) tempo, P(M(1,1))
```

```
Do h = 1,1200
```

```
Do n = 1,40000
```

```
dt = cf*dx*M(n,1001)/G(n,1001)
```

```
Do j = 2,1000
```

```
f = 4*0,001375*(1+(20000*(30e-6/dia)+1e6/Re)**(1/3))
```

```
Mmais05=0.5*(M(n,j+1)+M(n,j))-(dt/dx)*(G(n,j+1)-G(n,j))
```

```
Mmeno05=0.5*(M(n,j)+M(n,j-1))-(dt/dx)*(G(n,j)-G(n,j-1))
```

```
Gmais05=0.5*(G(n,j+1)+G(n,j))-(dt/dx)*(G(n,j+1)**2/M(n,j+1)-  
G(n,j)**2/M(n,j)+P(M(n,j+1))-P(M(n,j)))-dt*f*(G(n,j+1)**2/M(n,j+1)+G(n,j)**2/M(n,j))/4/dia
```

```

Gmeno05=0.5*(G(n,j)+G(n,j-1))-(dt/dx)*(G(n,j)**2/M(n,j)-G(n,j-1)**2/M(n,j-
1)+P(M(n,j))-P(M(n,j-1)))-dt*f*(G(n,j)**2/M(n,j)+G(n,j-1)**2/M(n,j-1))/4/dia
M(n+1,j)=M(n,j)-(dt/dx)*(Gmais05-Gmeno05)
G(n+1,j)=G(n,j)-(dt/dx)*(Gmais05**2/Mmais05-Gmeno05**2/Mmeno05+P(Mmais05)-
P(Mmeno05))-dt*f*(G(n,j)**2)/2/dia/M(n,j)
G(n+1,1)=G(n+1,2)
M(n+1,1)=M(n+1,2)
enddo
tempo=tempo+dt
M(n+1,1001)= -0.0005*M(n+1,1000)**2 + 0.6901*M(n+1,1000) - 1.046
G(n+1,1001)=10985*tempo**(-0.3026)
enddo
write(6,*) tempo,P(M(40001,1))
write(*,*) tempo,P(M(40001,1)),cf
if(tempo.gt.3000.and.temp0.lt.5000)then
cf=0.05
else
if(tempo.ge.5000.and.temp0.lt.7000)then
cf=0.1
else
if(tempo.ge.7000.and.temp0.lt.12000)then
cf=0.3
else
if(tempo.ge.12000)then
cf=0.6
endif
endif
endif
endif
if(tempo.ge.20000)then
stop
endif
Do j = 1,1001
M(1,j)=M(40001,j)

```

```
G(1,j)=G(40001,j)
enddo
enddo
close(6)
stop
end
real function P(M)
real M
if(M.ge.100)then
P = 2.248127E+02*M**2 + 1.809034E+04*M + 1.824431E+06
else
P = 3.297694E+01*M**2 + 5.418672E+04*M + 9.301257E+04
endif
end function
```